



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Feb 22, 2025 – 03:42 PM EST

PDB ID : 9BDT
EMDB ID : EMD-44469
Title : Apolipoprotein B 100 bound to LDL receptor and legobody
Authors : Dearborn, A.D.; Reimund, M.; Graziano, G.; Lei, H.; Kumar, A.; Neufeld, E.B.; Remaley, A.T.; Marcotrigiano, J.
Deposited on : 2024-04-12
Resolution : 5.40 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

The types of validation reports are described at

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

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev117
Mogul : 2022.3.0, CSD as543be (2022)
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.41.4

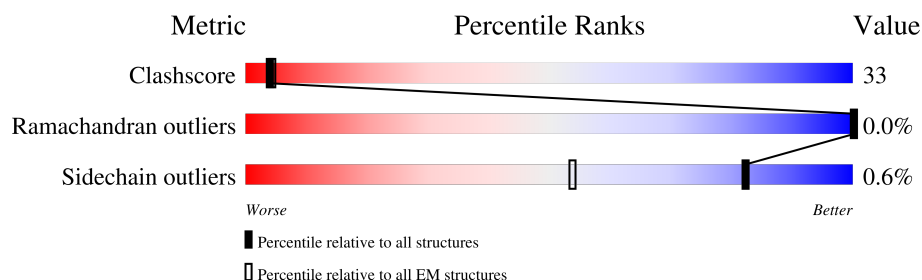
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 5.40 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	210492	15764
Ramachandran outliers	207382	16835
Sidechain outliers	206894	16415

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	4563	
2	H	234	
3	L	219	
4	B	545	
5	I	860	
5	R	860	
6	N	131	
7	G	2	

2 Entry composition [i](#)

There are 9 unique types of molecules in this entry. The entry contains 38899 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 Apolipoprotein B-100.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	3476	Total	C	N	O	S	0	0
			27163	17244	4563	5277	79		

- Molecule 2 is a protein called Legobody 8D3 Fab Heavy Chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	H	203	Total	C	N	O	S	0	0
			1540	978	255	298	9		

- Molecule 3 is a protein called Legobody 8D3 Fab Light Chain.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
3	L	198	Total	C	N	O	S	0	0
			1410	887	232	286	5		

- Molecule 4 is a protein called Maltodextrin-binding protein,Immunoglobulin G-binding protein A,Immunoglobulin G-binding protein G.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
4	B	514	Total	C	N	O	S	0	0
			3948	2517	647	776	8		

There are 47 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	2	MET	-	initiating methionine	UNP C3SHQ8
B	362	ALA	GLN	conflict	UNP P99134
B	363	LEU	ASN	conflict	UNP P99134
B	366	ALA	TYR	conflict	UNP P99134
B	368	ILE	VAL	conflict	UNP P99134
B	370	ILE	ASN	conflict	UNP P99134
B	375	THR	ASN	conflict	UNP P99134
B	376	GLU	ALA	conflict	UNP P99134

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
B	377	GLU	ASP	conflict	UNP P99134
B	392	VAL	GLN	conflict	UNP P99134
B	394	LYS	ALA	conflict	UNP P99134
B	395	GLU	ASN	conflict	UNP P99134
B	396	ILE	VAL	conflict	UNP P99134
B	398	ALA	GLY	conflict	UNP P99134
B	401	LYS	GLN	conflict	UNP P99134
B	405	GLU	ASP	conflict	UNP P99134
B	406	HIS	SER	conflict	UNP P99134
B	?	-	ALA	deletion	UNP P99134
B	411	GLY	ASP	conflict	UNP P99134
B	412	GLY	ALA	conflict	UNP P99134
B	413	SER	GLN	conflict	UNP P99134
B	414	GLY	GLN	conflict	UNP P99134
B	415	GLY	ASN	conflict	UNP P99134
B	416	ALA	ASN	conflict	UNP P99134
B	417	GLY	PHE	conflict	UNP P99134
B	418	SER	ASN	conflict	UNP P99134
B	419	GLY	LYS	conflict	UNP P99134
B	469	GLY	-	linker	UNP P99134
B	470	GLY	-	linker	UNP P99134
B	471	GLY	-	linker	UNP P99134
B	472	SER	-	linker	UNP P99134
B	473	GLY	-	linker	UNP P99134
B	474	GLY	-	linker	UNP P99134
B	475	GLY	-	linker	UNP P99134
B	476	SER	-	linker	UNP P99134
B	477	GLY	-	linker	UNP P99134
B	478	GLY	-	linker	UNP P99134
B	479	SER	-	linker	UNP P99134
B	538	GLY	-	expression tag	UNP P06654
B	539	SER	-	expression tag	UNP P06654
B	540	GLY	-	expression tag	UNP P06654
B	541	HIS	-	expression tag	UNP P06654
B	542	HIS	-	expression tag	UNP P06654
B	543	HIS	-	expression tag	UNP P06654
B	544	HIS	-	expression tag	UNP P06654
B	545	HIS	-	expression tag	UNP P06654
B	546	HIS	-	expression tag	UNP P06654

- Molecule 5 is a protein called Low-density lipoprotein receptor.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
5	I	256	Total	C	N	O	S	0	0
			1925	1230	317	373	5		
5	R	273	Total	C	N	O	S	0	0
			1910	1133	324	409	44		

- Molecule 6 is a protein called ApoB100 nanobody 4.

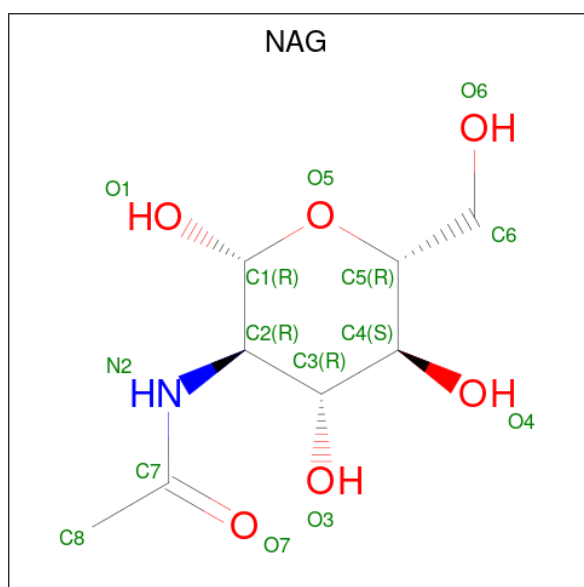
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
6	N	128	Total	C	N	O	S	0	0
			912	572	162	174	4		

- Molecule 7 is an oligosaccharide called 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose.



Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf	Trace
7	G	2	Total	C	N	O	0	0
			28	16	2	10		

- Molecule 8 is 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose (three-letter code: NAG) (formula: $C_8H_{15}NO_6$).



Mol	Chain	Residues	Atoms				AltConf
8	A	1	Total	C	N	O	0
			14	8	1	5	
8	A	1	Total	C	N	O	0
			14	8	1	5	
8	A	1	Total	C	N	O	0
			14	8	1	5	
8	A	1	Total	C	N	O	0
			14	8	1	5	

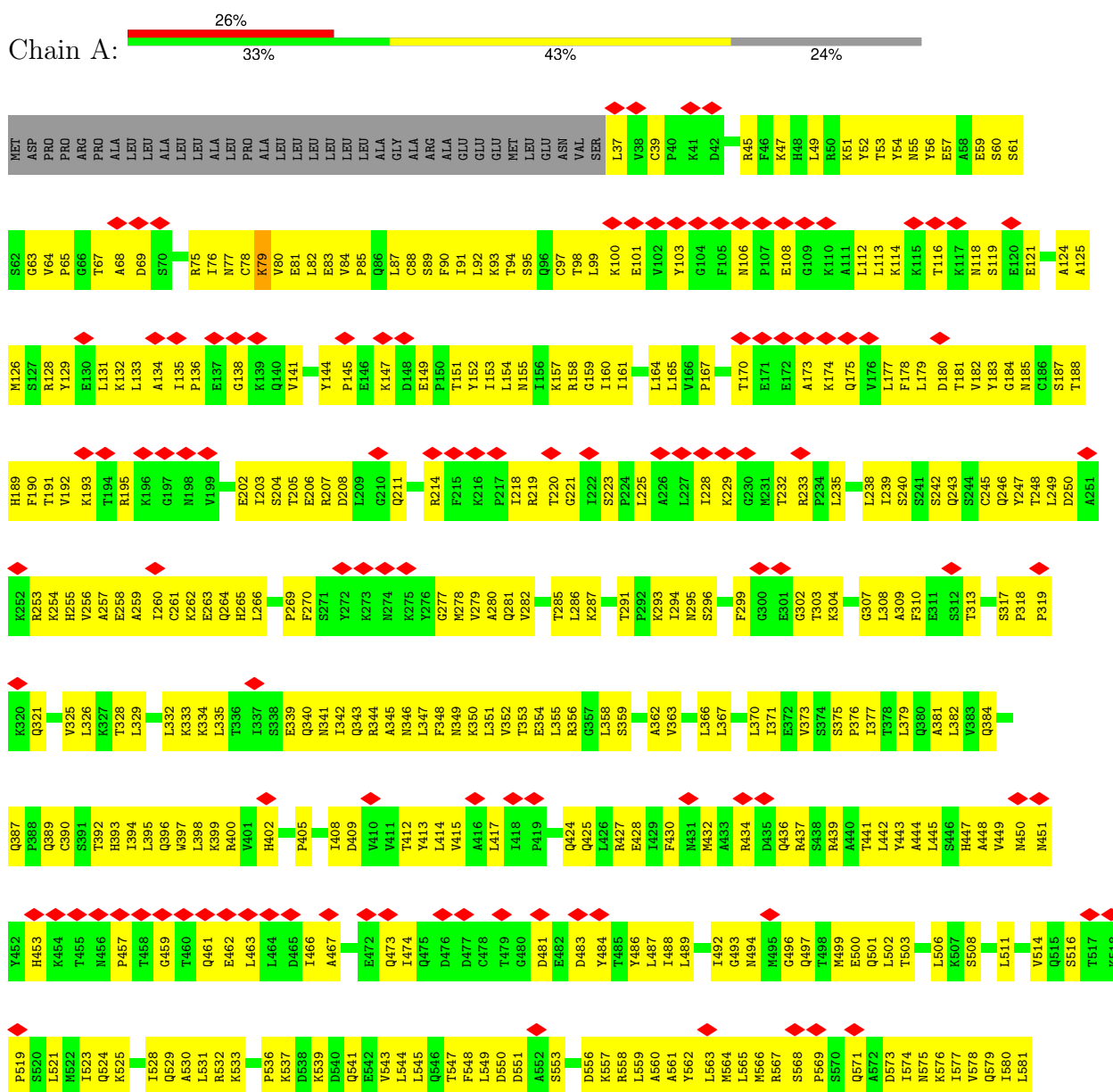
- Molecule 9 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
9	R	7	Total	Ca	0
			7	7	

3 Residue-property plots

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

• Molecule 1: Apolipoprotein B-100

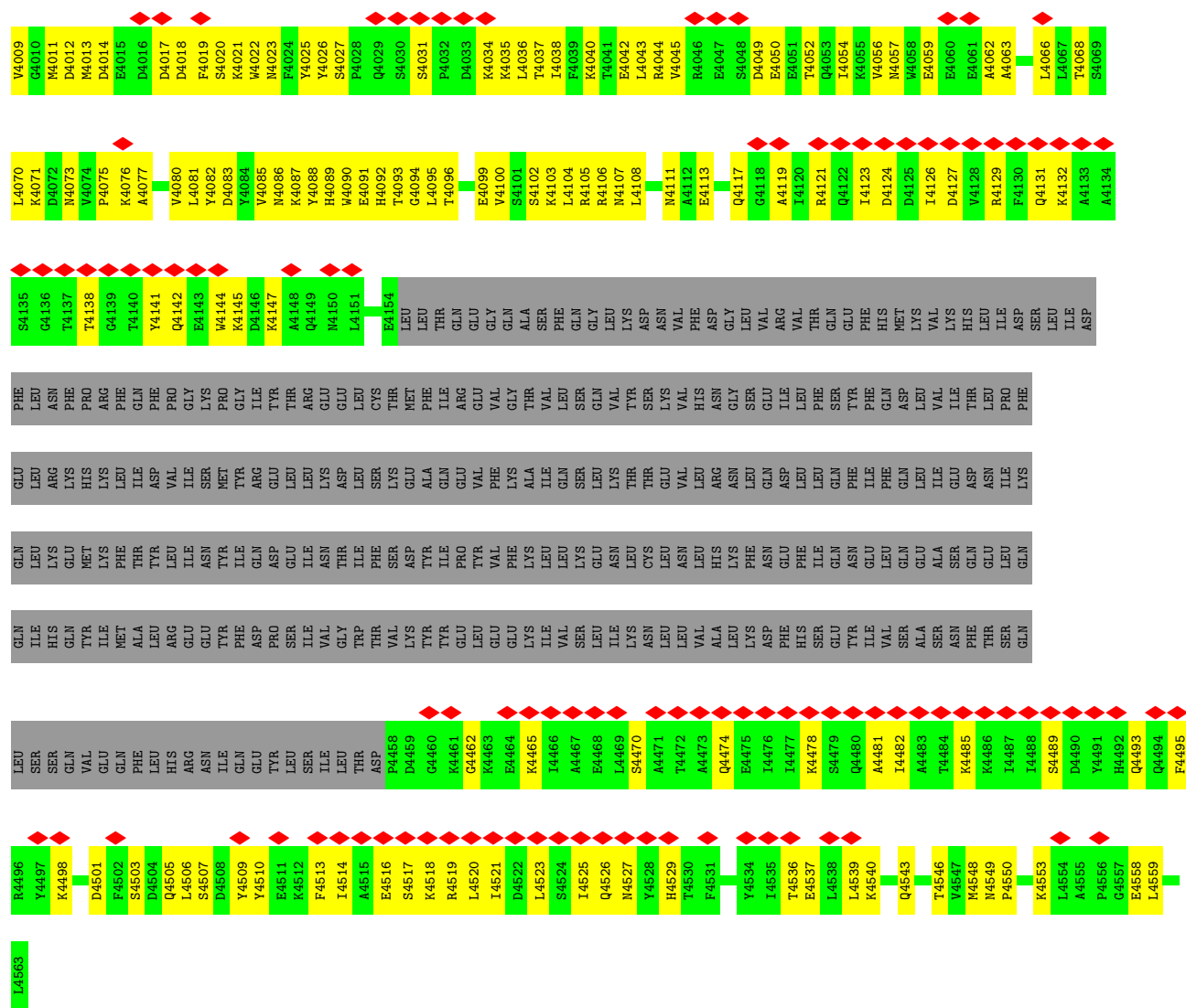




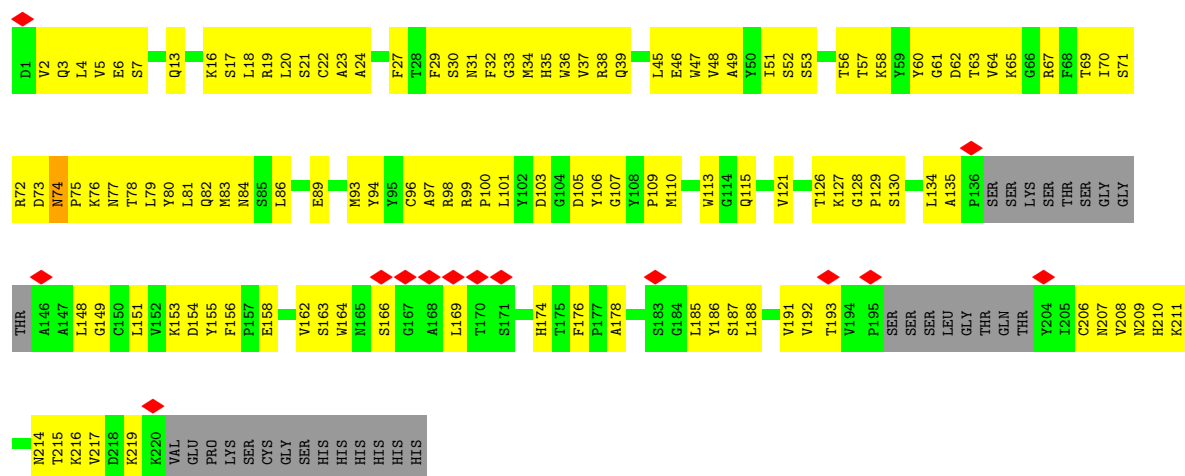


A3082	E3012	I2946	D2884	12819	T2754	LEU	PHE	TRP	ARG	E2453	L2393	LYS	LYS	ASP	GLN	ASP
Q3083	G3013	S2947	S2885	N2820	F2755	ARG	LYS	ALA	GLU	T2454	V2394	ILE	ILE	GLU	ASN	HIS
Q3084	K3014	T2948	T2887	P2821	G2756	LEU	ASP	ARG	LEU	Q2455	G2395	ILE	ALA	TYR	ILE	HIS
A3085	A3015	I2950	K2888	L2822	K2757	VAL	ASN	MET	ASP	A2456	F2396	GLU	ARG	PHE	ILE	HIS
S3086	A3016	E2951	K2889	A2823	L2758	GLU	ILE	ALA	THR	L2457	I2397	ILE	ALA	GLN	ARG	ILE
W3087	F3017	G2952	H2891	L2824	Y2759	ASP	LYS	LEU	ARG	E2458	D2398	GLN	LYS	HIS	VAL	ARG
Q3088	W3018	P2953	K2892	K2825	S2760	ILE	ILE	VAL	ASP	L2459	D2399	VAL	VAL	ASN	VAL	VAL
	G3019	L2954	L2893	S2827	K2762	PRO	PRO	GLU	ARG	P2460	A2400	HIS	HIS	ALA	ALA	ALA
	R3020	T2955	N2894	W2828	K2763	LEU	SER	GLN	MET	Q2461	V2401	GLU	GLY	VAL	VAL	VAL
	H3021	F2956	L2895	K2829	I2764	ALA	ARG	PHE	TYR	K2462	K2401	LEU	LYS	LYS	THR	THR
	K3028	F2957	L2895	K2829	Q2765	ARG	PHE	GLY	GLN	K2463	K2402	ILE	ILE	THR	ILE	ILE
	G3031	G2958	P2896	K2830	S2766	ILE	SER	THR	ASP	E2464	K2403	GLU	GLU	LYS	LYS	LYS
		L2959	K2837	F2831	T2767	THR	THR	VAL	ILE	A2465	L2404	ARG	ARG	GLN	GLN	HIS
		N2961	L2768	F2769	L2768	PRO	PRO	PRO	ILE	A2466	N2405	TYR	TYR	ILE	ILE	ASP
		K2962	T2770	T2770	T2770	ASP	PHE	ILE	GLN	L2467	E2406	GLU	VAL	GLU	GLU	GLU
		L2963	PHE	PHE	PHE	THR	THR	LYS	GLU	K2467	L2407	ASP	VAL	HIS	HIS	HIS
		N2964	ARG	ARG	ARG	ILE	ILE	THR	LEU	L2468	S2408	GLN	GLN	ALA	ALA	ALA
			LEU	LEU	LEU	PRO	ASN	ILE	GLN	F2469	F2409	ILE	ILE	ILE	ILE	PHE
			PRO	PRO	PRO	E2715	THR	GLY	TYR	LEU	K2410	GLN	GLN	ARG	ARG	ASN
				A2775	D2776	I2716	THR	THR	LEU	GLU	T2411	VAL	VAL	ILE	ILE	ILE
				L2777	I2777	A2717	HIS	MET	SER	THR	F2412	LEU	LEU	ASP	ASP	ASP
				G2778	G2778	I2718	ILE	PRO	LEU	LYS	I2413	MET	MET	LEU	LEU	PHE
				K2780	K2780	P2719	PRO	ALA	VAL	ALA	E2414	ASP	ASP	GLN	GLN	LYS
				THR	THR	E2720	PHE	GLU	GLN	THR	D2415	LEU	LEU	SER	SER	LYS
				THR	THR	I2721	THR	VAL	VAL	ALA	V2416	VAL	VAL	GLY	GLY	GLY
				SER	SER	F2721	ILE	SER	TYR	VAL	N2417	GLU	GLU	THR	THR	SER
				ALA	ALA	I2722	ASP	LEU	SER	TYR	K2418	LEU	LEU	THR	THR	SER
				ASN	ASN	I2723	PHE	GLN	THR	TYR	F2419	ALA	ALA	ILE	ILE	THR
				GLU	GLU	P2724	VAL	LEU	VAL	GLU	L2420	GLN	GLN	PHE	PHE	SER
				A2787	A2787	I2725	MET	GLN	THR	SER	D2421	TYR	TYR	GLU	TRP	TRP
				G2788	G2788	L2726	LYS	LYS	TYR	LEU	M2422	LYS	LYS	ARG	ARG	ILE
				A2790	A2790	N2727	VAL	ALA	ILE	GLN	L2423	LEU	LEU	ILE	ILE	GLN
						I2728	LYS	PHE	ASP	ASP	I2424	LYS	LYS	ASP	ASP	ASN
						N2729	ILE	THR	TRP	THR	K2425	THR	THR	ILE	ILE	VAL
						F2731	ARG	THR	TRP	ILE	K2426	ILE	ILE	THR	THR	THR
						K2732	THR	PRO	THR	THR	L2427	GLN	GLN	GLY	GLY	LYS
						V2733	ASP	PHE	LEU	LEU	K2428	LEU	LEU	VAL	VAL	GLN
						F2734	GLN	THR	ALA	ILE	S2429	SER	SER	ILE	ILE	ILE
						D2735	ASN	VAL	ASN	TRP	F2430	ASN	ASN	ILE	ILE	ARG
						K2736	LEU	PRO	LEU	LEU	D2431	VAL	VAL	PHE	PHE	HIS
						L2737	ASN	THR	THR	GLN	Y2432	GLN	GLN	VAL	VAL	GLN
						H2737	SER	ASP	ASP	GLU	H2433	GLN	GLN	ILE	ILE	ILE
						I2738	GLU	THR	THR	ALA	Q2434	VAL	VAL	ASN	ASN	GLN
						P2739	LEU	LEU	PHE	ALA	F2435	VAL	VAL	LEU	LEU	LYS
						E2740	GLN	ARG	ALA	SER	T2436	ILE	ILE	GLY	GLY	LYS
						F2741	PRO	PRO	TRP	SER	D2437	ASP	ASP	ASP	PHE	GLN
						Q2742	VAL	VAL	TYR	ALA	E2438	TYR	TYR	GLU	GLU	LEU
						L2743	PRO	VAL	SER	LEU	T2439	SER	SER	VAL	VAL	LYS
						I2746	ASP	GLN	ILE	ALA	N2440	ILE	ILE	ALA	ALA	ARG
						S2747	TYR	ILE	ASN	LYS	D2441	GLN	GLN	ALA	ALA	ALA
						H2748				LYS	K2442	LYS	LYS	LYS	LYS	LYS
						T2749				LYS	I2443	LYS	LYS	LYS	LYS	LYS
						I2750				PHE	R2444	LYS	LYS	LYS	LYS	LYS
						E2751					E2445					
						V2752					V2446					
						P2753					T2447					
											Q2448					
											R2449					
											L2450					
											N2451					
											G2452					

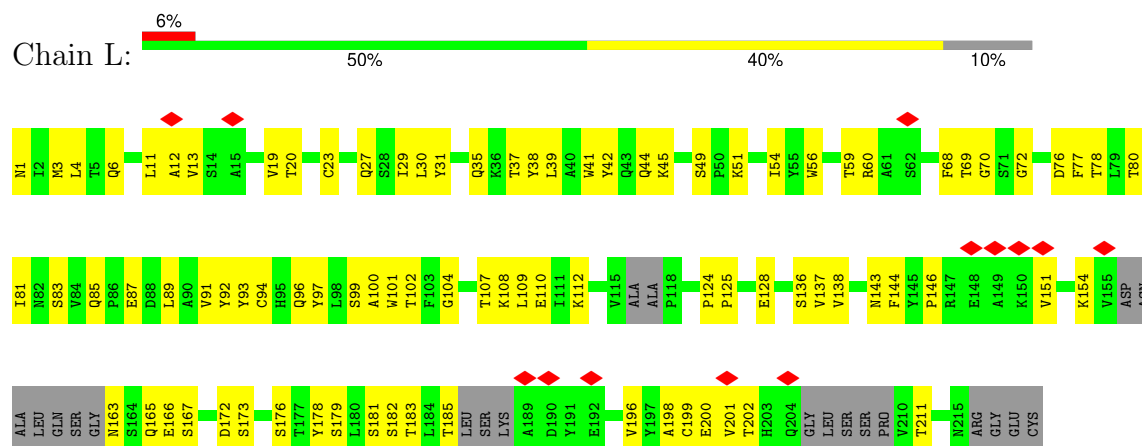




• Molecule 2: Legobody 8D3 Fab Heavy Chain



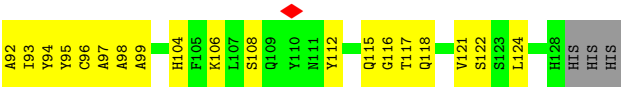
- Molecule 3: Legobody 8D3 Fab Light Chain



- Molecule 4: Maltodextrin-binding protein,Immunoglobulin G-binding protein A,Immunoglobulin G-binding protein G



- Molecule 5: Low-density lipoprotein receptor



● Molecule 7: 2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose-(1-4)-2-acetamido-2-deoxy-beta-D-glucopyranose



4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	527598	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	51.38	Depositor
Minimum defocus (nm)	600	Depositor
Maximum defocus (nm)	2000	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 BIOCONTINUUM (6k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.376	Depositor
Minimum map value	-0.122	Depositor
Average map value	0.001	Depositor
Map value standard deviation	0.008	Depositor
Recommended contour level	0.1	Depositor
Map size (Å)	557.76, 557.76, 557.76	wwPDB
Map dimensions	336, 336, 336	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.6600001, 1.6600001, 1.6600001	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	0.25	0/27687	0.51	0/37490
2	H	0.29	0/1581	0.56	0/2155
3	L	0.25	0/1438	0.50	0/1973
4	B	0.25	0/4032	0.45	0/5473
5	I	0.25	0/1969	0.53	0/2700
5	R	0.26	0/1944	0.53	0/2637
6	N	0.25	0/930	0.53	0/1258
All	All	0.25	0/39581	0.51	0/53686

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

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	27163	0	26925	1750	0
2	H	1540	0	1470	133	0
3	L	1410	0	1265	66	0
4	B	3948	0	3850	273	0
5	I	1925	0	1789	161	0
5	R	1910	0	1516	108	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
6	N	912	0	824	49	0
7	G	28	0	25	1	0
8	A	56	0	52	4	0
9	R	7	0	0	0	0
All	All	38899	0	37716	2498	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 33.

All (2498) 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)
2:H:83:MET:HB3	2:H:86:LEU:HD21	1.40	1.00
1:A:3549:ASN:HB3	1:A:3564:GLU:HB3	1.42	1.00
1:A:3590:GLU:HB2	1:A:3597:SER:HB2	1.48	0.95
5:I:534:THR:HB	5:I:565:GLY:HA2	1.50	0.94
4:B:456:VAL:HA	4:B:459:GLU:HB3	1.50	0.92
5:R:300:ARG:HH22	5:R:305:TRP:HA	1.35	0.91
4:B:82:THR:H	4:B:275:LYS:HE3	1.40	0.85
5:I:525:ASP:HB3	5:I:530:PHE:HB2	1.59	0.85
1:A:3464:PHE:HB3	1:A:3473:ALA:H	1.40	0.85
1:A:2012:ARG:HH12	1:A:2054:ILE:H	1.24	0.85
1:A:1942:PHE:HB2	1:A:1970:ALA:HB3	1.58	0.84
1:A:243:GLN:HG2	1:A:263:GLU:HB3	1.57	0.84
1:A:326:LEU:HA	1:A:329:LEU:HD12	1.60	0.84
1:A:3729:LYS:HA	1:A:3771:TYR:HA	1.59	0.83
5:R:310:ILE:HA	5:R:313:CYS:HB3	1.60	0.83
5:I:405:ASN:HB2	5:I:408:GLU:HB3	1.60	0.82
5:I:543:LYS:HA	5:I:555:LEU:H	1.45	0.82
1:A:220:THR:HG22	1:A:221:GLY:H	1.46	0.81
1:A:240:SER:HB2	1:A:266:LEU:H	1.46	0.80
1:A:347:LEU:HD23	1:A:350:LYS:HZ3	1.46	0.80
1:A:1542:LEU:HB2	1:A:1563:TYR:HB3	1.64	0.80
5:I:608:PRO:HB3	5:I:620:TRP:HB2	1.63	0.79
1:A:207:ARG:HB2	1:A:243:GLN:HB3	1.64	0.79
1:A:1630:ILE:HG23	1:A:1640:ALA:HB1	1.64	0.79
1:A:519:PRO:HB2	1:A:523:ILE:HD13	1.65	0.79
1:A:3666:GLU:HB3	1:A:3699:ARG:HB3	1.62	0.79
1:A:1602:TYR:HB3	1:A:1613:SER:H	1.48	0.79
1:A:1764:LEU:H	1:A:1788:LEU:HB3	1.48	0.79
2:H:113:TRP:HE1	3:L:49:SER:HB2	1.47	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1581:PHE:HD1	1:A:1606:TYR:HB2	1.48	0.78
1:A:1162:SER:H	1:A:1182:THR:HA	1.48	0.78
2:H:39:GLN:HB3	2:H:93:MET:HB3	1.66	0.77
1:A:3621:ALA:HB3	1:A:3632:ARG:HB3	1.65	0.77
4:B:373:ASN:HD22	4:B:408:ALA:HB2	1.49	0.77
5:I:480:ALA:H	5:I:491:THR:HB	1.50	0.77
1:A:3060:PHE:HB2	1:A:3064:LEU:HB2	1.66	0.77
1:A:250:ASP:HB2	1:A:255:HIS:H	1.49	0.76
1:A:665:ASN:HD22	1:A:698:GLU:HB2	1.50	0.76
1:A:960:ARG:HE	1:A:980:ALA:HB1	1.50	0.76
1:A:3386:ARG:HE	5:R:214:TRP:HZ3	1.32	0.76
5:R:72:ASP:HA	5:R:84:PRO:HA	1.67	0.76
1:A:202:GLU:HA	1:A:248:THR:HA	1.68	0.76
2:H:154:ASP:HA	2:H:185:LEU:HB3	1.68	0.76
4:B:40:GLU:HG3	4:B:42:PRO:HD3	1.65	0.76
1:A:1138:LEU:HB2	1:A:1149:GLN:HB2	1.68	0.76
4:B:278:ALA:HA	4:B:281:PHE:HB3	1.67	0.76
1:A:245:CYS:HB2	1:A:261:CYS:HA	1.68	0.75
2:H:129:PRO:HD3	2:H:210:HIS:HB2	1.68	0.75
1:A:183:TYR:HA	1:A:310:PHE:HB2	1.66	0.75
1:A:1698:SER:H	1:A:1713:ALA:HB3	1.52	0.75
1:A:294:ILE:HG22	1:A:296:SER:H	1.52	0.75
2:H:22:CYS:HB3	2:H:79:LEU:HD22	1.69	0.75
4:B:108:TYR:HB2	4:B:266:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:382:LEU:HB2	1:A:390:CYS:HB3	1.69	0.75
1:A:1490:PHE:HB2	1:A:1497:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:45:ARG:NH2	1:A:167:PRO:O	2.20	0.74
5:I:479:LEU:H	5:I:522:ILE:HG22	1.52	0.74
1:A:51:LYS:HB2	1:A:294:ILE:HD11	1.69	0.74
1:A:1928:TYR:HB3	1:A:1947:LYS:HB2	1.68	0.74
4:B:74:GLN:NE2	4:B:334:ASN:O	2.20	0.74
1:A:214:ARG:HB3	1:A:839:PRO:HB3	1.68	0.74
1:A:1118:ARG:HB2	1:A:1139:ALA:HB3	1.70	0.74
1:A:3618:GLN:HE22	1:A:3634:LYS:H	1.35	0.74
1:A:634:SER:O	1:A:635:ARG:NH1	2.20	0.74
1:A:848:ILE:HA	1:A:887:MET:HA	1.70	0.74
1:A:3490:PHE:H	1:A:3521:LEU:HD23	1.53	0.74
5:R:153:PHE:HB2	5:R:163:GLN:HG3	1.70	0.74
1:A:1012:GLU:HG2	1:A:1013:GLN:HG2	1.70	0.74
1:A:936:LEU:HB3	1:A:1003:LEU:HB3	1.69	0.74
5:I:479:LEU:HD13	5:I:522:ILE:HG21	1.69	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3098:TYR:HA	1:A:3119:GLY:HA2	1.69	0.73
5:I:534:THR:HG22	5:I:566:ILE:HG22	1.68	0.73
1:A:1277:LEU:HD22	1:A:1365:ASN:HD22	1.52	0.73
1:A:661:PHE:HA	1:A:669:LYS:H	1.54	0.73
4:B:251:THR:HA	4:B:256:PRO:HA	1.70	0.73
1:A:344:ARG:HA	1:A:347:LEU:HB2	1.70	0.73
1:A:1033:LEU:HB3	1:A:1051:PHE:HB3	1.70	0.73
1:A:1817:GLU:HB2	1:A:1820:LYS:HB2	1.71	0.73
2:H:210:HIS:O	2:H:214:ASN:N	2.21	0.73
1:A:2796:LYS:HA	1:A:2807:ASP:HA	1.71	0.73
1:A:3034:LYS:HB3	1:A:3053:GLU:HB3	1.71	0.73
1:A:3384:THR:HG21	1:A:3398:ALA:HB3	1.70	0.73
1:A:931:ARG:HH12	1:A:934:LYS:HG2	1.54	0.73
1:A:1392:LYS:HB2	1:A:1403:ASN:HD22	1.54	0.73
1:A:56:TYR:OH	1:A:842:ALA:O	2.07	0.73
1:A:885:THR:HB	1:A:901:MET:HB2	1.71	0.72
1:A:1968:VAL:HG22	1:A:1982:LYS:H	1.53	0.72
1:A:3267:MET:HA	1:A:3275:PRO:HA	1.69	0.72
1:A:51:LYS:HZ1	1:A:81:GLU:HB2	1.53	0.72
1:A:1820:LYS:HA	1:A:1845:ALA:HA	1.71	0.72
1:A:2988:ILE:HB	1:A:3004:ALA:HB3	1.71	0.72
1:A:204:SER:HA	1:A:246:GLN:HA	1.71	0.72
1:A:392:THR:HG21	1:A:424:GLN:HG3	1.71	0.72
1:A:1434:ASN:HB2	1:A:1456:ASP:HB3	1.70	0.72
4:B:161:PRO:HB3	4:B:259:PRO:HA	1.69	0.72
1:A:4506:LEU:HA	1:A:4509:TYR:HB2	1.72	0.72
1:A:55:ASN:HA	1:A:79:LYS:HA	1.72	0.72
5:R:284:CYS:SG	5:R:303:ARG:N	2.62	0.72
1:A:1992:TYR:HA	1:A:2013:THR:HG22	1.70	0.72
1:A:4131:GLN:HE21	1:A:4481:ALA:HB3	1.54	0.72
1:A:3813:ILE:HG22	1:A:3869:PHE:H	1.55	0.72
3:L:1:ASN:H1	3:L:100:ALA:HB3	1.55	0.71
1:A:81:GLU:HG2	1:A:93:LYS:HG3	1.72	0.71
1:A:3604:ALA:O	1:A:3616:LEU:N	2.23	0.71
2:H:20:LEU:HD22	2:H:81:LEU:HD23	1.72	0.71
1:A:1392:LYS:HD2	1:A:1403:ASN:HB2	1.70	0.71
1:A:3903:LYS:HB3	1:A:3910:GLU:HB3	1.71	0.71
1:A:4014:ASP:HB2	1:A:4021:LYS:HE3	1.72	0.71
1:A:2014:LEU:HB2	1:A:2051:GLU:HA	1.73	0.71
1:A:3088:GLN:HG3	1:A:3101:ASN:OD1	1.90	0.71
1:A:329:LEU:HD11	1:A:370:LEU:HD13	1.73	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3913:LEU:HB3	1:A:3930:VAL:HB	1.71	0.71
1:A:3544:LEU:HD13	1:A:3569:ASN:HB3	1.71	0.71
1:A:1664:LEU:O	1:A:1689:ARG:NH1	2.23	0.71
1:A:2793:ILE:HB	1:A:2810:ALA:HB3	1.73	0.71
1:A:4086:ASN:O	1:A:4090:TRP:N	2.22	0.71
1:A:75:ARG:HB3	1:A:113:LEU:HD21	1.72	0.70
4:B:376:GLU:HA	4:B:379:ARG:HE	1.57	0.70
5:I:646:LEU:HG	5:I:649:PRO:HA	1.74	0.70
1:A:350:LYS:HE2	1:A:950:THR:HG21	1.73	0.70
1:A:3772:LYS:HA	1:A:3798:THR:HB	1.71	0.70
1:A:1934:LYS:HE3	1:A:2735:ASP:HA	1.73	0.70
1:A:3910:GLU:HG2	1:A:3933:THR:HG22	1.72	0.70
5:R:349:GLN:O	5:R:350:ARG:NH1	2.23	0.70
1:A:75:ARG:HH12	1:A:77:ASN:HB2	1.57	0.70
5:R:309:PRO:HG2	5:R:334:ILE:HG13	1.72	0.70
1:A:496:GLY:O	1:A:500:GLU:N	2.24	0.70
1:A:838:LEU:HD23	1:A:848:ILE:HD11	1.73	0.70
5:I:499:SER:HB2	5:I:508:ARG:HD2	1.72	0.70
4:B:153:LEU:HD11	4:B:206:MET:HG3	1.73	0.70
1:A:3533:GLN:HG3	1:A:3547:LYS:HG3	1.72	0.70
2:H:6:GLU:HG2	2:H:22:CYS:HB2	1.73	0.70
1:A:3398:ALA:HA	1:A:3411:ASN:HB3	1.73	0.69
1:A:3465:ASN:HA	1:A:3472:THR:HG22	1.74	0.69
2:H:38:ARG:N	2:H:46:GLU:O	2.21	0.69
3:L:138:VAL:HA	3:L:183:THR:HA	1.72	0.69
1:A:1916:LYS:NZ	1:A:1925:GLY:O	2.25	0.69
1:A:243:GLN:HE22	1:A:261:CYS:HB3	1.56	0.69
1:A:3180:ASN:ND2	1:A:3333:ALA:O	2.25	0.69
2:H:82:GLN:HG2	4:B:444:GLN:HE22	1.58	0.69
5:I:610:SER:HA	5:I:651:ASP:HA	1.73	0.69
5:I:629:PHE:HA	5:I:641:LEU:HA	1.73	0.69
3:L:91:VAL:HA	3:L:108:LYS:HA	1.74	0.69
5:I:560:ILE:HG21	5:I:577:TRP:HE1	1.57	0.69
1:A:3436:LEU:HD12	1:A:3464:PHE:HB2	1.73	0.69
1:A:1904:THR:HA	1:A:1936:GLU:HG3	1.75	0.69
1:A:3562:LEU:HB3	5:R:310:ILE:HD12	1.75	0.69
4:B:8:LYS:HA	4:B:35:ILE:HG13	1.72	0.69
6:N:4:LEU:O	6:N:115:GLN:NE2	2.26	0.69
1:A:393:HIS:O	1:A:397:TRP:N	2.25	0.69
1:A:3038:PHE:HB2	1:A:3049:SER:HB3	1.73	0.69
2:H:24:ALA:HB1	2:H:27:PHE:HE1	1.58	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:345:ALA:O	1:A:349:ASN:ND2	2.25	0.69
1:A:1991:GLU:H	1:A:2014:LEU:HG	1.57	0.69
1:A:832:MET:SD	1:A:852:GLY:N	2.65	0.69
1:A:1507:ARG:HG3	1:A:1509:PRO:HD3	1.75	0.68
1:A:1869:ASN:HB3	1:A:1880:ASP:HB2	1.74	0.68
1:A:3649:GLU:HB3	1:A:3660:ASP:HB2	1.75	0.68
1:A:1750:LYS:HG3	1:A:1773:ILE:HB	1.75	0.68
1:A:1940:PHE:H	1:A:2738:ILE:HG13	1.58	0.68
1:A:3927:GLU:HB3	1:A:3950:ALA:HB3	1.75	0.68
1:A:1622:HIS:HB2	1:A:1648:GLY:HA2	1.75	0.68
2:H:36:TRP:HB3	2:H:48:VAL:HB	1.73	0.68
4:B:70:GLY:HA3	4:B:334:ASN:HB2	1.74	0.68
1:A:3031:GLY:HA3	1:A:3056:LEU:HD13	1.75	0.68
1:A:332:LEU:HD11	1:A:351:LEU:HG	1.76	0.68
1:A:3794:VAL:HB	1:A:3818:SER:HB2	1.75	0.68
1:A:449:VAL:O	1:A:453:HIS:N	2.25	0.68
1:A:497:GLN:OE1	1:A:533:LYS:NZ	2.26	0.68
5:I:484:ILE:HG22	5:I:660:GLN:HG3	1.76	0.68
1:A:3684:LEU:HA	1:A:3687:PHE:HB3	1.75	0.68
4:B:134:ILE:HG21	4:B:149:LEU:HD22	1.75	0.68
5:R:128:CYS:N	5:R:139:ASP:O	2.22	0.68
1:A:565:LEU:HG	1:A:569:PRO:HB3	1.76	0.68
1:A:1916:LYS:HZ2	1:A:1925:GLY:H	1.41	0.68
1:A:3625:ASN:O	1:A:3629:GLN:NE2	2.27	0.68
1:A:3672:LEU:HD11	1:A:3684:LEU:HB2	1.75	0.68
1:A:931:ARG:NH1	1:A:932:PRO:O	2.27	0.68
1:A:1851:TYR:HB2	1:A:1870:THR:HB	1.76	0.68
1:A:3592:SER:HB2	1:A:3595:GLN:HB3	1.76	0.68
1:A:3703:ARG:NH1	1:A:3705:SER:OG	2.27	0.68
1:A:175:GLN:HG3	1:A:190:PHE:HB3	1.76	0.68
1:A:232:THR:HA	1:A:235:LEU:HG	1.75	0.68
1:A:3695:SER:H	1:A:3698:ARG:HD2	1.59	0.68
2:H:31:ASN:HB3	2:H:101:LEU:HD11	1.76	0.68
4:B:194:LEU:HA	4:B:197:LEU:HB2	1.75	0.68
1:A:3425:VAL:HB	1:A:3444:LEU:HB3	1.74	0.67
2:H:153:LYS:HD2	2:H:187:SER:HB3	1.76	0.67
4:B:337:GLN:NE2	4:B:338:MET:SD	2.66	0.67
1:A:131:LEU:HB2	1:A:157:LYS:HE3	1.76	0.67
2:H:4:LEU:HD11	2:H:98:ARG:HB3	1.76	0.67
1:A:1133:ALA:HA	1:A:1154:ALA:HA	1.76	0.67
1:A:2891:HIS:HD2	1:A:2893:LEU:HD23	1.58	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:382:LEU:HD11	1:A:394:ILE:HB	1.76	0.67
1:A:1932:LEU:HD11	1:A:2733:VAL:HG13	1.75	0.67
5:I:564:ASN:HD21	5:I:609:PHE:HD1	1.42	0.67
1:A:3946:LYS:HE3	1:A:3959:GLU:HG2	1.77	0.67
4:B:44:LYS:HG2	4:B:47:GLU:HB2	1.76	0.67
1:A:1095:ASP:HA	1:A:1109:HIS:HA	1.76	0.67
1:A:1711:GLY:HA2	1:A:1728:ASN:HA	1.75	0.67
1:A:3244:ARG:NH1	1:A:3268:SER:O	2.27	0.67
1:A:3632:ARG:HH12	1:A:3647:GLN:HB2	1.60	0.67
2:H:149:GLY:HA2	2:H:164:TRP:HH2	1.60	0.67
1:A:689:GLU:HG3	1:A:776:TYR:HE1	1.58	0.67
1:A:1109:HIS:NE2	1:A:1111:SER:OG	2.27	0.67
1:A:1386:ARG:HG2	1:A:1410:THR:H	1.60	0.67
1:A:3930:VAL:HA	1:A:3947:GLY:HA2	1.77	0.67
4:B:23:ALA:O	4:B:27:LYS:N	2.27	0.67
4:B:117:LEU:HD13	4:B:250:PRO:HD3	1.77	0.67
1:A:551:ASP:OD1	1:A:585:GLN:NE2	2.28	0.67
1:A:979:GLY:HA2	1:A:1001:LEU:HA	1.76	0.67
1:A:1581:PHE:CD1	1:A:1606:TYR:HB2	2.30	0.67
1:A:4085:VAL:HA	1:A:4088:TYR:HD2	1.58	0.67
6:N:39:GLN:NE2	6:N:40:ALA:O	2.27	0.67
1:A:592:PHE:O	1:A:596:HIS:N	2.26	0.66
2:H:82:GLN:NE2	2:H:83:MET:O	2.26	0.66
1:A:1545:THR:HA	1:A:1560:SER:HA	1.77	0.66
1:A:3177:TYR:HB2	1:A:3337:ILE:HD13	1.78	0.66
1:A:3246:PHE:HB2	1:A:3265:ILE:HB	1.77	0.66
1:A:3789:VAL:HG11	1:A:3820:LEU:HD12	1.76	0.66
4:B:68:ARG:NH1	4:B:68:ARG:O	2.28	0.66
1:A:247:TYR:HD2	1:A:259:ALA:HB1	1.61	0.66
1:A:2906:LEU:HD13	1:A:2927:GLY:HA3	1.78	0.66
1:A:3240:ASP:O	1:A:3244:ARG:NH2	2.29	0.66
1:A:3572:GLN:HA	1:A:3578:PHE:HA	1.76	0.66
2:H:34:MET:HA	2:H:98:ARG:HA	1.78	0.66
1:A:2859:SER:HA	1:A:2868:GLU:HG3	1.78	0.66
1:A:3601:GLN:HA	1:A:3619:GLU:HA	1.78	0.66
1:A:2885:SER:HB2	1:A:2910:ILE:H	1.59	0.66
4:B:27:LYS:HA	4:B:30:GLU:HB3	1.78	0.66
5:I:531:MET:H	5:I:545:GLY:H	1.42	0.66
1:A:899:VAL:HG13	1:A:944:LEU:HA	1.77	0.66
1:A:1997:ASP:HB2	1:A:2008:GLU:HB3	1.76	0.66
6:N:93:ILE:HA	6:N:118:GLN:HA	1.77	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:208:ASP:O	1:A:211:GLN:NE2	2.28	0.66
1:A:341:ASN:HA	1:A:344:ARG:HD3	1.78	0.66
1:A:1644:THR:HB	1:A:1655:SER:HB2	1.77	0.66
1:A:1403:ASN:OD1	1:A:1405:GLN:NE2	2.27	0.65
1:A:3440:PHE:HE1	1:A:3458:MET:HB2	1.60	0.65
1:A:3886:ARG:NH1	1:A:3897:THR:OG1	2.28	0.65
1:A:3625:ASN:HD21	1:A:3628:ASN:HB3	1.61	0.65
1:A:4020:SER:HB2	1:A:4043:LEU:HB2	1.78	0.65
1:A:3034:LYS:O	1:A:3053:GLU:N	2.29	0.65
1:A:3270:PHE:HB2	1:A:3302:LEU:HD21	1.78	0.65
5:I:483:TRP:HE1	5:I:660:GLN:HB2	1.60	0.65
2:H:6:GLU:HA	2:H:22:CYS:HA	1.79	0.65
1:A:499:MET:HG2	1:A:502:LEU:HD12	1.77	0.65
3:L:6:GLN:HA	3:L:23:CYS:HA	1.79	0.65
1:A:1985:THR:HB	1:A:1992:TYR:HB2	1.78	0.65
4:B:485:LYS:HA	4:B:498:THR:HA	1.79	0.65
5:R:154:GLN:O	5:R:183:ARG:NH2	2.30	0.65
1:A:3017:PHE:HB3	1:A:3039:PHE:HB3	1.79	0.65
1:A:57:GLU:HB3	1:A:285:THR:H	1.62	0.65
1:A:962:SER:HA	1:A:980:ALA:HA	1.79	0.65
1:A:1932:LEU:HB3	1:A:1943:SER:HB3	1.79	0.65
1:A:3679:VAL:HA	1:A:4104:LEU:HD21	1.77	0.65
1:A:3915:SER:HB3	1:A:3928:LEU:HD23	1.79	0.65
2:H:174:HIS:HD2	2:H:192:VAL:HA	1.61	0.65
4:B:49:PHE:O	4:B:53:ALA:N	2.24	0.65
1:A:493:GLY:O	1:A:778:ARG:NH1	2.30	0.65
1:A:578:VAL:HG11	1:A:619:LEU:HA	1.79	0.65
1:A:1160:THR:H	1:A:1183:ASN:HB3	1.62	0.65
1:A:3563:TRP:HB3	1:A:3587:ALA:HB3	1.79	0.65
1:A:3666:GLU:HG3	1:A:3701:HIS:HA	1.79	0.65
5:R:74:SER:HA	5:R:82:CYS:HA	1.77	0.65
4:B:444:GLN:O	4:B:448:ASP:N	2.29	0.64
1:A:67:THR:HG22	1:A:990:ALA:HA	1.79	0.64
1:A:1588:ASP:O	1:A:1599:ARG:N	2.26	0.64
1:A:4068:THR:HA	1:A:4071:LYS:HD2	1.79	0.64
1:A:4113:GLU:OE1	1:A:4117:GLN:NE2	2.29	0.64
4:B:162:LEU:HB3	4:B:197:LEU:HD21	1.79	0.64
5:R:155:CYS:SG	5:R:159:THR:OG1	2.54	0.64
1:A:317:SER:H	1:A:893:ASP:HA	1.62	0.64
1:A:3771:TYR:HB2	1:A:3774:LEU:HD23	1.78	0.64
2:H:34:MET:SD	2:H:79:LEU:HD12	2.38	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:I:621:THR:HA	5:I:628:ILE:HA	1.78	0.64
1:A:1739:SER:HA	1:A:1756:SER:HA	1.80	0.64
1:A:2978:SER:HA	1:A:2984:SER:HA	1.80	0.64
1:A:3187:THR:HB	1:A:3328:HIS:HB2	1.78	0.64
1:A:183:TYR:HD2	1:A:214:ARG:HG2	1.62	0.64
1:A:348:PHE:HA	1:A:351:LEU:HB2	1.79	0.64
1:A:2835:LEU:HD13	1:A:2860:LEU:HB2	1.79	0.64
5:I:411:LYS:H	5:I:420:THR:H	1.43	0.64
1:A:2765:GLN:HE21	1:A:2770:THR:HG22	1.63	0.64
1:A:174:LYS:HA	1:A:191:THR:HA	1.78	0.64
5:I:526:PRO:HG2	5:I:570:LEU:HB2	1.80	0.64
1:A:656:GLU:HB2	1:A:674:LYS:HB3	1.78	0.64
1:A:1718:ILE:H	1:A:1721:VAL:HG12	1.63	0.64
1:A:4501:ASP:O	1:A:4505:GLN:N	2.30	0.64
5:I:501:ALA:HB1	5:I:505:GLY:HA2	1.79	0.64
1:A:1612:PHE:HB3	1:A:1631:LEU:HD23	1.78	0.64
1:A:4095:LEU:HD11	1:A:4099:GLU:HB3	1.80	0.64
2:H:24:ALA:O	2:H:77:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:223:SER:HB2	1:A:356:ARG:HH22	1.63	0.64
1:A:260:ILE:HG23	1:A:285:THR:HG22	1.80	0.63
1:A:524:GLN:HG2	1:A:557:LYS:HZ2	1.63	0.63
1:A:890:ILE:HG12	1:A:897:SER:H	1.62	0.63
1:A:904:ASN:HD22	1:A:941:THR:H	1.43	0.63
1:A:1136:GLU:OE1	1:A:1136:GLU:N	2.31	0.63
1:A:1290:ASN:OD1	1:A:1354:GLY:N	2.31	0.63
1:A:1906:THR:HG22	1:A:1934:LYS:HG3	1.80	0.63
1:A:3203:SER:O	1:A:3206:ARG:NH1	2.32	0.63
1:A:3560:TYR:HE1	1:A:3590:GLU:HG3	1.64	0.63
1:A:4031:SER:HB2	1:A:4034:LYS:HB3	1.81	0.63
1:A:181:THR:HG23	1:A:183:TYR:H	1.63	0.63
1:A:658:ASN:HB2	1:A:672:MET:HB2	1.81	0.63
1:A:1661:LYS:HG3	1:A:1666:VAL:HA	1.80	0.63
5:R:241:PHE:N	5:R:249:ILE:O	2.31	0.63
1:A:51:LYS:HD2	1:A:83:GLU:HB3	1.80	0.63
1:A:2794:THR:HG22	1:A:2809:GLN:HG2	1.81	0.63
1:A:3446:GLY:HA2	1:A:3454:VAL:HA	1.81	0.63
1:A:3550:PHE:HB2	1:A:3563:TRP:HE3	1.63	0.63
1:A:3601:GLN:HG3	1:A:3619:GLU:HG3	1.81	0.63
2:H:29:PHE:CD2	2:H:77:ASN:HA	2.33	0.63
5:R:197:CYS:SG	5:R:203:HIS:ND1	2.70	0.63
1:A:235:LEU:HA	1:A:238:LEU:HG	1.80	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1622:HIS:HA	1:A:1649:GLN:HG3	1.81	0.63
1:A:944:LEU:N	1:A:951:GLU:O	2.28	0.63
1:A:1793:LEU:HB2	1:A:1816:LEU:HB3	1.81	0.63
1:A:1841:ALA:HB3	1:A:1852:LYS:HB2	1.79	0.63
1:A:3958:TYR:HA	1:A:3976:LEU:HA	1.80	0.63
1:A:949:LYS:NZ	1:A:950:THR:O	2.32	0.63
1:A:2044:ASP:HA	1:A:2047:GLU:HG2	1.81	0.63
1:A:3634:LYS:HD3	1:A:3647:GLN:HB3	1.80	0.63
2:H:149:GLY:HA3	2:H:191:VAL:HG12	1.81	0.63
5:I:621:THR:HG21	5:I:649:PRO:HB2	1.81	0.63
6:N:20:LEU:HD12	6:N:81:LEU:HD23	1.81	0.63
1:A:242:SER:HB2	1:A:264:GLN:HE21	1.63	0.63
1:A:1506:GLN:HB2	1:A:1515:ASN:HB2	1.81	0.63
4:B:92:TYR:HB2	4:B:95:THR:HG23	1.79	0.63
5:I:523:VAL:HG21	5:I:568:LEU:H	1.64	0.63
5:R:114:PHE:N	5:R:122:ILE:O	2.31	0.63
1:A:580:ILE:O	1:A:584:GLU:N	2.31	0.62
1:A:1883:THR:N	1:A:1894:ASN:OD1	2.25	0.62
1:A:3984:THR:HB	1:A:4004:PRO:HD2	1.81	0.62
5:I:520:ARG:HH21	5:I:609:PHE:HB3	1.64	0.62
1:A:80:VAL:HG23	1:A:94:THR:HB	1.81	0.62
1:A:263:GLU:HG3	1:A:282:VAL:H	1.65	0.62
1:A:558:ARG:O	1:A:562:TYR:N	2.31	0.62
1:A:2053:THR:H	1:A:2767:PRO:HD3	1.65	0.62
1:A:3812:GLU:HB2	1:A:3868:LYS:HD3	1.80	0.62
1:A:91:ILE:HD12	1:A:132:LYS:HD2	1.81	0.62
1:A:1281:SER:OG	1:A:1363:TYR:N	2.32	0.62
1:A:1359:SER:HA	1:A:1372:SER:HA	1.80	0.62
1:A:4089:HIS:ND1	1:A:4095:LEU:O	2.28	0.62
2:H:36:TRP:O	2:H:48:VAL:N	2.21	0.62
1:A:3803:PRO:HD3	1:A:3810:PHE:H	1.65	0.62
1:A:974:ASN:N	1:A:1006:ARG:O	2.29	0.62
4:B:122:ASP:OD2	4:B:221:LYS:NZ	2.32	0.62
1:A:348:PHE:HB3	1:A:828:HIS:CE1	2.34	0.62
1:A:1946:TYR:HB2	1:A:1966:HIS:HB3	1.79	0.62
1:A:1981:TRP:N	1:A:1996:LEU:O	2.33	0.62
4:B:11:ILE:HD11	4:B:281:PHE:HZ	1.64	0.62
1:A:2961:ASN:OD1	1:A:2972:GLN:NE2	2.29	0.62
1:A:3668:HIS:ND1	1:A:3696:ILE:O	2.30	0.62
1:A:4489:SER:O	1:A:4493:GLN:NE2	2.31	0.62
4:B:453:SER:HA	4:B:456:VAL:HB	1.82	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2964:ASN:HA	1:A:2969:ARG:HG3	1.80	0.62
1:A:3425:VAL:O	1:A:3444:LEU:N	2.32	0.62
1:A:3622:LEU:HD13	1:A:3631:ILE:HB	1.80	0.62
1:A:3703:ARG:HB3	1:A:3890:ASP:HB3	1.81	0.62
1:A:4006:VAL:HA	1:A:4070:LEU:HD21	1.81	0.62
4:B:44:LYS:O	4:B:48:LYS:N	2.33	0.62
6:N:39:GLN:NE2	6:N:43:LYS:O	2.33	0.62
1:A:708:GLN:NE2	1:A:713:ASP:OD1	2.33	0.62
1:A:1514:LEU:HB3	1:A:1537:TYR:HB3	1.80	0.62
2:H:127:LYS:NZ	2:H:128:GLY:O	2.27	0.62
5:R:116:CYS:SG	5:R:138:SER:OG	2.58	0.62
1:A:233:ARG:NH2	1:A:4050:GLU:O	2.33	0.62
1:A:558:ARG:NH1	1:A:584:GLU:OE2	2.32	0.62
1:A:1896:PHE:HA	1:A:1909:ALA:HA	1.81	0.62
1:A:3687:PHE:HD1	1:A:3688:LEU:HD22	1.65	0.62
1:A:3859:GLU:OE1	1:A:3861:THR:OG1	2.18	0.62
5:I:403:PHE:HD2	5:I:646:LEU:HD13	1.64	0.62
1:A:497:GLN:H	1:A:533:LYS:HZ2	1.48	0.61
1:A:640:TYR:HE1	1:A:652:SER:HA	1.65	0.61
1:A:844:LEU:HD11	1:A:891:ILE:HA	1.82	0.61
1:A:3454:VAL:N	1:A:3483:LEU:O	2.33	0.61
1:A:3952:ARG:NH1	1:A:4088:TYR:OH	2.33	0.61
5:R:331:ASP:HA	5:R:336:TYR:HA	1.80	0.61
1:A:118:ASN:HB2	1:A:321:GLN:HE21	1.64	0.61
1:A:591:ASN:OD1	1:A:635:ARG:NH1	2.33	0.61
1:A:774:ARG:HD2	1:A:788:SER:HB2	1.81	0.61
1:A:1287:TYR:HA	1:A:1356:LEU:HA	1.82	0.61
1:A:3474:LYS:O	1:A:3501:LYS:N	2.33	0.61
1:A:3560:TYR:CE1	1:A:3590:GLU:HG3	2.34	0.61
1:A:4045:VAL:HG13	1:A:4052:THR:HA	1.80	0.61
3:L:45:LYS:H	3:L:51:LYS:HZ1	1.48	0.61
3:L:172:ASP:O	3:L:176:SER:N	2.31	0.61
1:A:395:LEU:HB2	1:A:412:THR:HG22	1.83	0.61
1:A:629:ASP:O	1:A:635:ARG:NH2	2.33	0.61
1:A:956:LEU:O	1:A:960:ARG:NH1	2.31	0.61
1:A:1930:LYS:HB3	1:A:1945:ASP:HB3	1.83	0.61
1:A:3812:GLU:OE1	1:A:3812:GLU:N	2.32	0.61
1:A:3819:GLN:NE2	1:A:3820:LEU:O	2.33	0.61
1:A:2994:SER:HB3	1:A:2998:GLY:H	1.65	0.61
1:A:3201:ILE:O	1:A:3205:ASP:N	2.33	0.61
1:A:3745:VAL:HG22	1:A:3763:LEU:H	1.66	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3903:LYS:N	1:A:3910:GLU:O	2.32	0.61
1:A:64:VAL:HG22	1:A:278:MET:HA	1.83	0.61
1:A:2448:GLN:O	1:A:2451:ASN:ND2	2.34	0.61
4:B:10:VAL:HG13	4:B:38:THR:HB	1.82	0.61
4:B:313:LEU:HB3	4:B:319:ILE:HD13	1.81	0.61
6:N:45:ARG:NH2	6:N:108:SER:O	2.33	0.61
1:A:701:LEU:HA	1:A:704:LEU:HD12	1.83	0.61
1:A:804:ARG:O	1:A:804:ARG:NH1	2.30	0.61
1:A:974:ASN:O	1:A:1006:ARG:N	2.34	0.61
4:B:117:LEU:HD21	4:B:128:PRO:HG2	1.82	0.61
5:I:632:ASN:HB2	5:I:637:SER:HA	1.81	0.61
1:A:571:GLN:HB3	1:A:614:LEU:HD22	1.82	0.61
1:A:3364:ALA:HB3	1:A:3385:THR:HB	1.82	0.61
1:A:4001:ALA:HB3	1:A:4009:VAL:HB	1.82	0.61
4:B:138:ASP:HA	4:B:148:ALA:HB3	1.82	0.61
5:I:431:ALA:O	5:I:444:SER:N	2.30	0.61
1:A:1745:SER:HA	1:A:1750:LYS:HA	1.82	0.61
5:I:405:ASN:N	5:I:408:GLU:O	2.34	0.61
1:A:45:ARG:HB3	1:A:254:LYS:HB3	1.82	0.61
1:A:347:LEU:HA	1:A:350:LYS:HG2	1.83	0.61
1:A:629:ASP:OD1	1:A:631:ARG:NE	2.32	0.61
1:A:3953:ASP:OD1	1:A:4088:TYR:OH	2.19	0.61
2:H:53:SER:O	2:H:72:ARG:NH2	2.34	0.61
4:B:488:ILE:N	4:B:495:GLY:O	2.31	0.61
5:I:404:THR:HG22	5:I:409:VAL:HG13	1.83	0.61
5:I:578:VAL:HG12	5:I:611:LEU:HD21	1.81	0.61
1:A:155:ASN:HA	1:A:158:ARG:HG2	1.83	0.61
5:I:480:ALA:HB2	5:I:498:VAL:HB	1.83	0.61
5:I:481:VAL:HB	5:I:489:TYR:HA	1.82	0.61
1:A:1451:GLY:O	1:A:1470:HIS:ND1	2.33	0.60
1:A:1738:LEU:O	1:A:1757:LEU:N	2.34	0.60
4:B:436:GLU:HA	4:B:439:ARG:HB2	1.83	0.60
1:A:129:TYR:O	1:A:157:LYS:NZ	2.35	0.60
1:A:158:ARG:NH1	1:A:307:GLY:O	2.34	0.60
1:A:1568:LEU:HB2	1:A:1591:PHE:HB3	1.81	0.60
1:A:2908:ASN:HA	1:A:2925:GLY:HA2	1.83	0.60
5:I:626:GLU:O	5:I:646:LEU:N	2.34	0.60
1:A:114:LYS:HE2	1:A:116:THR:HG22	1.82	0.60
1:A:379:LEU:HD22	1:A:394:ILE:HG13	1.84	0.60
1:A:665:ASN:ND2	1:A:698:GLU:OE1	2.33	0.60
1:A:3401:LEU:HD21	1:A:3406:VAL:HG12	1.82	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:100:LYS:HB3	1:A:113:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:536:PRO:HB2	1:A:541:GLN:HE21	1.66	0.60
1:A:851:SER:N	1:A:884:VAL:O	2.34	0.60
1:A:1828:LYS:NZ	1:A:1829:GLY:O	2.34	0.60
1:A:1910:HIS:ND1	1:A:1929:SER:O	2.34	0.60
1:A:3719:PHE:HB2	1:A:3875:ILE:HD11	1.81	0.60
6:N:2:VAL:HA	6:N:26:GLY:HA3	1.83	0.60
5:R:73:PHE:N	5:R:83:ILE:O	2.35	0.60
1:A:443:TYR:HB3	1:A:447:HIS:CE1	2.36	0.60
1:A:1134:ARG:HH22	1:A:1155:THR:HG23	1.65	0.60
1:A:3368:SER:HB3	1:A:3381:LEU:HB2	1.82	0.60
1:A:3527:ARG:NH2	5:R:308:GLU:O	2.34	0.60
1:A:4008:THR:N	1:A:4027:SER:O	2.35	0.60
3:L:1:ASN:N	3:L:99:SER:O	2.35	0.60
5:I:404:THR:HA	5:I:409:VAL:HA	1.83	0.60
5:I:587:SER:O	5:I:594:ASN:ND2	2.30	0.60
1:A:489:LEU:HB2	1:A:530:ALA:HB2	1.83	0.60
1:A:612:LYS:HA	1:A:615:VAL:HB	1.82	0.60
1:A:1286:LYS:O	1:A:1357:ASP:N	2.34	0.60
1:A:3082:ALA:HB1	1:A:3107:ASN:HA	1.82	0.60
4:B:154:GLN:OE1	4:B:346:ARG:NH1	2.34	0.60
1:A:52:TYR:HB2	1:A:82:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:1286:LYS:HB2	1:A:1357:ASP:HB3	1.83	0.60
1:A:3002:LEU:HD23	1:A:3021:HIS:HB2	1.81	0.60
1:A:3017:PHE:O	1:A:3039:PHE:N	2.33	0.60
1:A:4138:THR:O	1:A:4142:GLN:NE2	2.34	0.60
2:H:135:ALA:HB3	3:L:124:PRO:HD2	1.84	0.60
1:A:52:TYR:O	1:A:82:LEU:N	2.34	0.60
1:A:977:THR:HA	1:A:1003:LEU:HA	1.82	0.60
1:A:1112:CYS:SG	1:A:1118:ARG:NH1	2.75	0.60
1:A:1118:ARG:N	1:A:1139:ALA:O	2.35	0.60
1:A:1686:THR:O	1:A:1697:PHE:N	2.32	0.60
1:A:2069:ILE:HB	1:A:2750:ILE:HB	1.84	0.60
1:A:2918:HIS:HA	1:A:2951:GLU:HA	1.83	0.60
1:A:3229:LYS:HG3	1:A:3232:LYS:HD3	1.83	0.60
1:A:4119:ALA:O	1:A:4123:ILE:N	2.33	0.60
4:B:19:TYR:HB2	4:B:39:VAL:HG21	1.84	0.60
4:B:290:GLU:HA	4:B:293:GLU:HG2	1.82	0.60
1:A:3403:ASN:OD1	1:A:3404:LYS:N	2.35	0.60
1:A:3584:THR:O	1:A:3603:HIS:N	2.28	0.60
4:B:9:LEU:H	4:B:35:ILE:HG21	1.67	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
4:B:431:MET:O	4:B:439:ARG:NH2	2.34	0.60
1:A:249:LEU:HA	1:A:256:VAL:HA	1.83	0.60
1:A:396:GLN:OE1	1:A:400:ARG:NE	2.32	0.60
1:A:494:ASN:HD21	1:A:783:GLU:HB3	1.65	0.60
1:A:612:LYS:O	1:A:616:LYS:N	2.35	0.60
1:A:675:THR:HG22	1:A:688:ILE:HG22	1.84	0.60
1:A:1514:LEU:N	1:A:1537:TYR:O	2.34	0.60
1:A:1586:LYS:HG3	1:A:1601:GLU:HB2	1.84	0.60
1:A:1628:ALA:N	1:A:1643:ALA:O	2.35	0.60
1:A:3628:ASN:HA	1:A:3653:ASP:HA	1.83	0.60
5:I:520:ARG:HB2	5:I:536:TRP:CZ3	2.37	0.60
6:N:98:ALA:HB3	6:N:112:TYR:HB2	1.83	0.60
5:R:67:THR:OG1	5:R:68:CYS:N	2.34	0.60
1:A:695:LYS:HZ2	1:A:772:GLU:HG2	1.67	0.59
1:A:1367:TYR:HA	1:A:1395:SER:HA	1.84	0.59
1:A:2817:PRO:HG2	1:A:2819:ILE:HG12	1.84	0.59
1:A:3926:TYR:HB3	1:A:3951:HIS:HD2	1.67	0.59
1:A:4008:THR:HB	1:A:4027:SER:HB2	1.84	0.59
1:A:4088:TYR:O	1:A:4092:HIS:ND1	2.35	0.59
3:L:166:GLU:HA	3:L:182:SER:HA	1.83	0.59
4:B:87:PHE:HZ	4:B:287:LEU:HB3	1.66	0.59
1:A:76:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HA	1.85	0.59
1:A:4536:THR:HA	1:A:4539:LEU:HD12	1.83	0.59
2:H:67:ARG:HH22	2:H:86:LEU:HA	1.68	0.59
5:I:401:LEU:N	5:I:412:MET:O	2.31	0.59
1:A:886:ASN:HB3	1:A:900:GLN:HA	1.84	0.59
1:A:942:LEU:HB3	1:A:953:ILE:HD12	1.83	0.59
1:A:1800:ASP:HA	1:A:1809:THR:HA	1.83	0.59
1:A:3522:ASN:OD1	1:A:3523:SER:N	2.35	0.59
1:A:3975:HIS:HB2	1:A:3989:ARG:HA	1.83	0.59
2:H:134:LEU:HD21	2:H:151:LEU:HD23	1.84	0.59
5:I:409:VAL:HB	5:I:424:PRO:HA	1.84	0.59
5:R:92:GLN:NE2	5:R:93:VAL:O	2.35	0.59
1:A:528:ILE:O	1:A:532:ARG:N	2.35	0.59
1:A:1508:ASP:HB3	1:A:1513:ARG:H	1.67	0.59
1:A:2086:GLN:HA	1:A:2089:ILE:HB	1.83	0.59
6:N:12:VAL:O	6:N:122:SER:N	2.35	0.59
1:A:398:LEU:HB3	1:A:408:ILE:HG12	1.83	0.59
1:A:405:PRO:HA	1:A:408:ILE:HB	1.83	0.59
1:A:1386:ARG:HD3	1:A:1409:GLU:HG2	1.83	0.59
4:B:84:ASP:H	4:B:279:LYS:HE3	1.68	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
4:B:283:GLU:HA	4:B:287:LEU:HB2	1.84	0.59
4:B:366:ALA:O	4:B:370:ILE:N	2.33	0.59
1:A:343:GLN:O	1:A:347:LEU:N	2.32	0.59
1:A:1712:SER:HB2	1:A:1727:PHE:HB3	1.84	0.59
1:A:3430:LYS:HA	1:A:3439:ASN:HA	1.85	0.59
3:L:143:ASN:H	3:L:179:SER:HA	1.67	0.59
1:A:45:ARG:HH11	1:A:249:LEU:HG	1.67	0.59
1:A:3045:GLU:HG2	1:A:3079:SER:HA	1.83	0.59
1:A:52:TYR:HB3	1:A:54:TYR:CE1	2.38	0.59
1:A:190:PHE:HZ	1:A:195:ARG:HH21	1.51	0.59
1:A:1882:SER:OG	1:A:1894:ASN:O	2.21	0.59
1:A:1925:GLY:HA2	1:A:1950:THR:HA	1.84	0.59
1:A:3909:VAL:N	1:A:3934:HIS:O	2.29	0.59
1:A:3928:LEU:HB2	1:A:3949:PHE:HD1	1.68	0.59
1:A:4126:ILE:HA	1:A:4129:ARG:HB2	1.84	0.59
2:H:166:SER:N	2:H:207:ASN:OD1	2.36	0.59
5:I:578:VAL:HG11	5:I:608:PRO:HB2	1.85	0.59
1:A:52:TYR:HB3	1:A:54:TYR:HE1	1.68	0.59
1:A:525:LYS:HD3	1:A:556:ASP:HB3	1.84	0.59
1:A:840:THR:HG23	1:A:842:ALA:H	1.68	0.59
1:A:908:GLU:OE1	1:A:931:ARG:NH1	2.36	0.59
1:A:1864:PHE:HD1	1:A:1885:TYR:HB2	1.67	0.59
1:A:2984:SER:N	1:A:3008:ALA:O	2.36	0.59
1:A:3052:ASN:HB3	1:A:3072:ASN:HB2	1.83	0.59
1:A:3074:TYR:HD1	1:A:3087:TRP:HA	1.67	0.59
3:L:39:LEU:HA	3:L:96:GLN:HA	1.85	0.59
3:L:165:GLN:O	3:L:183:THR:N	2.36	0.59
4:B:282:LEU:O	4:B:287:LEU:N	2.22	0.59
4:B:330:GLU:N	4:B:330:GLU:OE1	2.35	0.59
4:B:465:GLU:N	4:B:465:GLU:OE1	2.34	0.59
5:I:524:VAL:HG12	5:I:531:MET:SD	2.43	0.59
1:A:511:LEU:HD13	1:A:543:VAL:HG11	1.84	0.59
1:A:773:ALA:HB3	1:A:789:LEU:HB2	1.84	0.59
1:A:1522:PHE:N	1:A:1529:GLY:O	2.35	0.59
1:A:1653:SER:HA	1:A:1674:GLU:HA	1.85	0.59
1:A:3512:THR:N	1:A:3535:THR:OG1	2.35	0.59
1:A:3544:LEU:HA	1:A:3569:ASN:HA	1.85	0.59
2:H:129:PRO:HB3	2:H:155:TYR:HB3	1.85	0.59
4:B:157:TYR:HD2	4:B:342:TRP:HH2	1.48	0.59
1:A:49:LEU:N	1:A:84:VAL:O	2.36	0.58
1:A:263:GLU:OE1	1:A:265:HIS:ND1	2.32	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:692:LEU:HD13	1:A:775:ALA:HB2	1.85	0.58
1:A:925:ILE:HG23	1:A:1013:GLN:HB2	1.85	0.58
1:A:1548:SER:HB2	1:A:1557:ASN:H	1.68	0.58
1:A:497:GLN:H	1:A:533:LYS:NZ	2.01	0.58
1:A:3604:ALA:HB3	1:A:3616:LEU:HB2	1.85	0.58
5:R:255:CYS:N	5:R:266:ASP:O	2.34	0.58
1:A:2422:MET:HA	1:A:2425:LYS:HB2	1.83	0.58
1:A:2940:GLY:N	1:A:2964:ASN:O	2.33	0.58
3:L:110:GLU:OE1	3:L:110:GLU:N	2.36	0.58
1:A:698:GLU:HA	1:A:701:LEU:HB2	1.84	0.58
4:B:66:HIS:CE1	4:B:331:ILE:HG13	2.38	0.58
1:A:173:ALA:HA	1:A:195:ARG:HD2	1.84	0.58
1:A:560:ALA:HA	1:A:563:LEU:HD12	1.85	0.58
1:A:940:ASN:N	1:A:999:THR:O	2.28	0.58
1:A:1109:HIS:HB3	1:A:1121:LYS:HE3	1.83	0.58
1:A:1558:THR:O	1:A:1573:ASP:N	2.37	0.58
1:A:1710:LEU:HB3	1:A:1729:PHE:HD2	1.68	0.58
1:A:1814:LEU:O	1:A:1815:ARG:NH1	2.35	0.58
2:H:158:GLU:OE2	2:H:211:LYS:N	2.36	0.58
1:A:2831:SER:HA	1:A:2836:ARG:HG3	1.84	0.58
2:H:5:VAL:HG23	2:H:23:ALA:HB3	1.85	0.58
3:L:72:GLY:HA3	3:L:77:PHE:HA	1.85	0.58
1:A:335:LEU:O	1:A:859:LYS:NZ	2.34	0.58
1:A:587:GLU:O	1:A:591:ASN:N	2.34	0.58
1:A:3419:LYS:HE3	1:A:3855:ILE:HG12	1.85	0.58
1:A:838:LEU:HG	1:A:846:LEU:HB3	1.86	0.58
1:A:3941:LEU:HD23	1:A:3964:TYR:HE2	1.69	0.58
5:I:547:LEU:HB3	5:I:666:TRP:HE1	1.67	0.58
1:A:548:PHE:HA	1:A:558:ARG:HB3	1.84	0.58
1:A:3802:GLN:HA	1:A:3809:PRO:HA	1.86	0.58
4:B:449:ASP:HB3	4:B:452:GLN:H	1.69	0.58
5:I:482:ASP:HA	5:I:524:VAL:HG21	1.86	0.58
5:I:520:ARG:HB2	5:I:536:TRP:HZ3	1.69	0.58
5:R:128:CYS:SG	5:R:143:CYS:N	2.76	0.58
1:A:1282:ASP:OD1	1:A:1361:ASN:ND2	2.37	0.58
1:A:1796:THR:HA	1:A:1813:LYS:HG3	1.86	0.58
1:A:3097:LYS:N	1:A:3120:GLU:O	2.37	0.58
1:A:3132:ILE:HB	1:A:3146:PRO:HA	1.85	0.58
4:B:20:ASN:OD1	4:B:299:LYS:NZ	2.37	0.58
4:B:112:VAL:HG12	4:B:263:VAL:HG22	1.85	0.58
1:A:333:LYS:HB2	1:A:373:VAL:HG13	1.85	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:381:ALA:O	1:A:384:GLN:NE2	2.33	0.57
1:A:1096:ILE:O	1:A:1108:GLY:N	2.36	0.57
1:A:1284:ARG:H	1:A:1359:SER:HB2	1.69	0.57
1:A:2089:ILE:HG12	1:A:2405:ASN:HD22	1.68	0.57
1:A:3051:ASN:HA	1:A:3073:ASN:HA	1.85	0.57
1:A:4022:TRP:HZ3	1:A:4043:LEU:HD13	1.69	0.57
5:I:571:LEU:HD22	5:I:658:LEU:HD11	1.85	0.57
1:A:54:TYR:N	1:A:80:VAL:O	2.24	0.57
1:A:228:ILE:HD13	1:A:832:MET:HB3	1.86	0.57
1:A:447:HIS:O	1:A:451:ASN:N	2.29	0.57
1:A:923:LYS:HG3	1:A:925:ILE:HG13	1.84	0.57
1:A:1738:LEU:HB3	1:A:1757:LEU:HB2	1.86	0.57
1:A:1849:ALA:HB3	1:A:1872:ILE:HB	1.85	0.57
1:A:3114:HIS:ND1	1:A:3173:VAL:O	2.28	0.57
1:A:3578:PHE:H	1:A:3609:SER:HB3	1.69	0.57
1:A:3732:ILE:HB	1:A:3768:ILE:HD12	1.86	0.57
1:A:4144:TRP:HA	1:A:4147:LYS:HB2	1.86	0.57
3:L:76:ASP:OD1	3:L:77:PHE:N	2.37	0.57
5:I:423:ILE:HG21	5:I:454:THR:HB	1.86	0.57
5:I:531:MET:H	5:I:545:GLY:N	2.01	0.57
5:I:630:SER:HB3	5:I:640:ASN:HB2	1.86	0.57
1:A:180:ASP:HA	1:A:185:ASN:HA	1.86	0.57
1:A:516:SER:O	1:A:557:LYS:NZ	2.37	0.57
1:A:826:PHE:HA	1:A:857:GLY:HA3	1.87	0.57
1:A:1926:GLN:N	1:A:1949:SER:O	2.37	0.57
1:A:2004:LYS:HD3	1:A:2064:GLN:HE22	1.68	0.57
1:A:3265:ILE:HA	1:A:3278:VAL:HG12	1.85	0.57
1:A:3437:ARG:HB3	1:A:3463:ASP:HB3	1.86	0.57
1:A:3673:LYS:HA	1:A:3683:SER:HB2	1.86	0.57
1:A:4462:GLY:HA2	1:A:4465:LYS:HE2	1.85	0.57
5:I:646:LEU:HD21	5:I:650:GLU:H	1.70	0.57
6:N:33:ASN:O	6:N:99:ALA:N	2.37	0.57
1:A:2809:GLN:O	1:A:2829:LYS:N	2.37	0.57
4:B:289:ASP:OD1	4:B:308:SER:OG	2.20	0.57
4:B:393:SER:HA	4:B:396:ILE:HG12	1.86	0.57
4:B:424:ALA:O	4:B:428:ILE:N	2.38	0.57
4:B:435:ASN:H	4:B:438:GLN:HE21	1.52	0.57
1:A:1721:VAL:HG23	1:A:1746:TYR:HB2	1.87	0.57
1:A:1898:SER:HB2	1:A:1907:ILE:HG23	1.84	0.57
1:A:3055:ASN:HA	1:A:3069:ASP:HA	1.87	0.57
1:A:3099:ASN:HB3	1:A:3118:ASN:HB2	1.87	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3556:LEU:HD13	1:A:3865:PRO:HG2	1.86	0.57
2:H:18:LEU:HB3	2:H:83:MET:HB2	1.87	0.57
4:B:30:GLU:O	4:B:34:GLY:N	2.36	0.57
5:I:404:THR:HG23	5:I:432:LEU:HD13	1.84	0.57
1:A:282:VAL:HB	1:A:889:ILE:HD13	1.87	0.57
1:A:596:HIS:HA	1:A:636:ASN:HD22	1.70	0.57
1:A:777:LEU:N	1:A:783:GLU:OE2	2.36	0.57
1:A:798:LEU:O	1:A:802:GLY:N	2.31	0.57
1:A:1553:GLY:HA3	1:A:1578:TYR:CD1	2.40	0.57
1:A:1866:HIS:ND1	1:A:1883:THR:OG1	2.35	0.57
1:A:3549:ASN:O	1:A:3564:GLU:N	2.28	0.57
1:A:3565:HIS:HB3	1:A:3585:SER:H	1.70	0.57
1:A:3630:LYS:HA	1:A:3651:SER:HA	1.86	0.57
1:A:4021:LYS:HA	1:A:4042:GLU:HG3	1.87	0.57
5:I:562:TRP:CD1	5:I:580:SER:HB2	2.40	0.57
1:A:1107:MET:N	1:A:1123:VAL:O	2.29	0.57
1:A:1973:THR:HG22	1:A:2738:ILE:HG23	1.85	0.57
1:A:3052:ASN:N	1:A:3072:ASN:O	2.37	0.57
1:A:4077:ALA:HA	1:A:4080:VAL:HG12	1.87	0.57
3:L:154:LYS:HB2	3:L:198:ALA:HB3	1.87	0.57
4:B:26:GLY:O	4:B:30:GLU:N	2.37	0.57
4:B:138:ASP:OD1	4:B:142:LYS:NZ	2.36	0.57
1:A:98:THR:HB	1:A:119:SER:HB2	1.86	0.57
1:A:492:ILE:HG23	1:A:506:LEU:HD21	1.87	0.57
1:A:1459:SER:O	1:A:1464:GLN:NE2	2.37	0.57
1:A:1734:GLU:O	1:A:1761:GLY:N	2.38	0.57
1:A:3410:HIS:HB2	1:A:3427:THR:HA	1.85	0.57
1:A:3895:ASN:N	1:A:3918:SER:O	2.37	0.57
1:A:3949:PHE:N	1:A:3956:ALA:O	2.36	0.57
1:A:4056:VAL:HB	1:A:4559:LEU:HB3	1.86	0.57
4:B:446:LEU:HD11	4:B:456:VAL:HG11	1.87	0.57
1:A:795:LEU:HA	1:A:798:LEU:HB2	1.87	0.57
1:A:851:SER:O	1:A:884:VAL:N	2.38	0.57
4:B:293:GLU:HB3	4:B:309:TYR:HE1	1.70	0.57
1:A:442:LEU:HD12	1:A:487:LEU:HG	1.86	0.57
1:A:847:GLN:O	1:A:888:GLY:N	2.34	0.57
1:A:3438:MET:HG2	1:A:3460:PHE:CE1	2.40	0.57
5:R:298:MET:H	5:R:308:GLU:HG2	1.70	0.57
1:A:147:LYS:HD3	1:A:304:LYS:HG2	1.85	0.56
1:A:191:THR:OG1	1:A:204:SER:O	2.19	0.56
1:A:1511:THR:O	1:A:1513:ARG:NH1	2.38	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3550:PHE:CE1	1:A:3561:SER:HB2	2.41	0.56
1:A:4107:ASN:O	1:A:4111:ASN:N	2.33	0.56
5:I:578:VAL:HG21	5:I:608:PRO:HG2	1.87	0.56
1:A:1029:LEU:HD23	1:A:1055:ARG:HH11	1.69	0.56
1:A:1730:LYS:O	1:A:1737:LYS:N	2.37	0.56
1:A:2969:ARG:N	1:A:2993:ASP:OD1	2.36	0.56
4:B:367:GLN:HA	4:B:370:ILE:HD12	1.87	0.56
5:R:249:ILE:HG22	5:R:253:ARG:HD2	1.86	0.56
1:A:413:TYR:HD1	1:A:444:ALA:HB2	1.69	0.56
1:A:447:HIS:HA	1:A:450:ASN:HB2	1.87	0.56
1:A:904:ASN:HD22	1:A:941:THR:N	2.04	0.56
1:A:1778:LYS:NZ	1:A:1804:ASN:OD1	2.39	0.56
1:A:1943:SER:HA	1:A:1969:SER:HA	1.86	0.56
1:A:3452:PRO:HB2	1:A:3485:SER:H	1.69	0.56
2:H:109:PRO:HD3	3:L:97:TYR:CZ	2.40	0.56
4:B:361:GLN:HB3	4:B:386:LEU:HD21	1.86	0.56
4:B:440:ASN:HA	4:B:443:ILE:HG22	1.86	0.56
6:N:33:ASN:N	6:N:99:ALA:O	2.38	0.56
6:N:104:HIS:O	6:N:106:LYS:N	2.38	0.56
1:A:318:PRO:N	1:A:319:PRO:HD3	2.20	0.56
1:A:399:LYS:HZ2	1:A:432:MET:HB2	1.70	0.56
1:A:1399:LEU:O	1:A:1428:HIS:NE2	2.38	0.56
1:A:1759:ILE:HD13	1:A:1764:LEU:HA	1.87	0.56
1:A:2931:TRP:HE1	1:A:2933:CYS:HG	1.52	0.56
4:B:136:ALA:O	4:B:139:LYS:NZ	2.38	0.56
5:I:451:ILE:HD13	5:I:476:PRO:HG3	1.86	0.56
1:A:366:LEU:HB3	1:A:370:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:474:ILE:HG22	1:A:488:ILE:HG13	1.88	0.56
1:A:850:SER:HA	1:A:885:THR:HA	1.88	0.56
1:A:3399:LEU:HD22	1:A:3410:HIS:HB3	1.86	0.56
1:A:3986:LEU:O	1:A:3987:HIS:ND1	2.38	0.56
3:L:85:GLN:NE2	3:L:87:GLU:OE2	2.37	0.56
4:B:131:TRP:CE2	4:B:250:PRO:HG2	2.40	0.56
1:A:92:LEU:HB3	1:A:131:LEU:HB3	1.88	0.56
1:A:3581:GLY:HA2	1:A:3606:GLN:HA	1.87	0.56
1:A:4014:ASP:O	1:A:4021:LYS:N	2.39	0.56
4:B:122:ASP:OD1	4:B:123:LEU:N	2.34	0.56
5:R:116:CYS:SG	5:R:117:HIS:N	2.78	0.56
1:A:340:GLN:HE22	1:A:343:GLN:H	1.54	0.56
1:A:960:ARG:NH2	1:A:998:ASP:O	2.38	0.56
1:A:2759:TYR:HA	1:A:2776:ASP:HA	1.86	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4043:LEU:HA	1:A:4054:ILE:HG12	1.88	0.56
2:H:37:VAL:HA	2:H:47:TRP:HA	1.87	0.56
1:A:126:MET:HA	1:A:153:ILE:HD12	1.88	0.56
1:A:852:GLY:HA2	1:A:883:PHE:HA	1.87	0.56
1:A:1573:ASP:HA	1:A:1586:LYS:HA	1.88	0.56
1:A:3632:ARG:NH1	1:A:3647:GLN:OE1	2.38	0.56
4:B:293:GLU:HB2	4:B:297:LYS:HZ3	1.70	0.56
4:B:450:PRO:HA	4:B:453:SER:HB3	1.87	0.56
5:R:266:ASP:OD1	5:R:267:GLU:N	2.38	0.56
1:A:106:ASN:ND2	1:A:108:GLU:OE2	2.39	0.56
1:A:392:THR:HG22	1:A:425:GLN:HA	1.88	0.56
1:A:2016:ASP:HA	1:A:2050:GLN:H	1.71	0.56
1:A:3344:LYS:HE2	5:R:164:LEU:O	2.06	0.56
2:H:153:LYS:NZ	2:H:154:ASP:OD1	2.34	0.56
4:B:26:GLY:HA3	4:B:37:VAL:HG23	1.87	0.56
5:I:545:GLY:HA2	5:I:552:ILE:HA	1.88	0.56
5:I:612:ALA:HB2	5:I:652:MET:HB2	1.88	0.56
1:A:773:ALA:O	1:A:789:LEU:N	2.32	0.56
1:A:3695:SER:HB3	1:A:3698:ARG:HG3	1.88	0.56
1:A:3889:VAL:N	1:A:3896:ALA:O	2.38	0.56
1:A:52:TYR:HH	1:A:255:HIS:CD2	2.23	0.55
1:A:3177:TYR:HE1	1:A:3335:GLY:HA3	1.70	0.55
1:A:3730:PHE:HB2	1:A:3770:ILE:HG13	1.87	0.55
3:L:154:LYS:HZ3	3:L:196:VAL:HG13	1.71	0.55
4:B:194:LEU:HD22	4:B:359:VAL:HB	1.88	0.55
5:I:526:PRO:O	5:I:662:ARG:NH1	2.32	0.55
6:N:35:GLY:O	6:N:97:ALA:N	2.30	0.55
1:A:80:VAL:HG11	1:A:160:ILE:HG21	1.88	0.55
1:A:1582:ALA:O	1:A:1603:GLN:NE2	2.39	0.55
1:A:2963:ILE:HG22	1:A:2970:VAL:HG22	1.86	0.55
1:A:3206:ARG:NH1	1:A:3832:SER:OG	2.39	0.55
4:B:179:ASP:HB2	4:B:182:ASP:HB2	1.87	0.55
5:I:577:TRP:O	5:I:586:SER:N	2.38	0.55
1:A:593:VAL:HA	1:A:596:HIS:HB2	1.88	0.55
1:A:1110:LEU:HD13	1:A:1120:ILE:HG13	1.87	0.55
1:A:1610:ARG:N	1:A:1634:ASP:OD1	2.40	0.55
1:A:2007:VAL:HG12	1:A:2060:TYR:HE1	1.70	0.55
1:A:3097:LYS:NZ	1:A:3099:ASN:HB2	2.21	0.55
1:A:3346:SER:OG	1:A:3347:VAL:N	2.39	0.55
1:A:3428:THR:HG23	1:A:3430:LYS:HE2	1.87	0.55
1:A:3432:GLN:HA	1:A:3438:MET:H	1.71	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:158:ARG:HG3	1:A:182:VAL:HG23	1.88	0.55
1:A:191:THR:O	1:A:204:SER:N	2.38	0.55
1:A:978:SER:HB2	1:A:1002:GLU:HG2	1.87	0.55
1:A:2940:GLY:HA3	1:A:2964:ASN:HB3	1.87	0.55
4:B:235:SER:O	4:B:239:THR:OG1	2.16	0.55
5:I:576:TYR:HA	5:I:587:SER:HA	1.87	0.55
1:A:514:VAL:O	1:A:557:LYS:NZ	2.32	0.55
1:A:514:VAL:HG12	1:A:547:THR:HG21	1.88	0.55
1:A:536:PRO:HD2	1:A:568:SER:HB3	1.87	0.55
1:A:1597:LEU:HD21	1:A:1599:ARG:HE	1.72	0.55
1:A:1742:MET:HB2	1:A:1753:HIS:HB3	1.89	0.55
1:A:2862:THR:HG22	1:A:2863:GLU:H	1.71	0.55
1:A:3107:ASN:O	1:A:3108:GLU:HG3	2.05	0.55
1:A:3115:VAL:H	1:A:3173:VAL:HB	1.70	0.55
1:A:4509:TYR:O	1:A:4513:PHE:N	2.32	0.55
2:H:39:GLN:N	2:H:93:MET:O	2.39	0.55
5:R:254:GLN:HA	5:R:266:ASP:HB2	1.87	0.55
1:A:675:THR:HG23	1:A:687:LEU:HB2	1.89	0.55
1:A:1489:GLN:HG2	1:A:1498:LYS:HD3	1.89	0.55
1:A:1576:GLY:O	1:A:1583:THR:N	2.40	0.55
1:A:1980:THR:HA	1:A:1997:ASP:HA	1.88	0.55
1:A:2955:THR:HB	1:A:2978:SER:H	1.72	0.55
1:A:3680:TYR:CZ	1:A:4093:THR:HB	2.42	0.55
1:A:4105:ARG:NE	1:A:4506:LEU:HB2	2.21	0.55
4:B:53:ALA:HA	4:B:269:ASN:HD21	1.71	0.55
4:B:100:ARG:O	4:B:173:TYR:OH	2.22	0.55
1:A:259:ALA:HB3	1:A:286:LEU:HB2	1.89	0.55
1:A:1130:GLN:HG2	1:A:1188:LYS:HE3	1.88	0.55
1:A:1596:ALA:H	1:A:1619:LEU:HG	1.72	0.55
1:A:3436:LEU:HD11	1:A:3462:TYR:HB2	1.88	0.55
1:A:3664:SER:HA	1:A:3703:ARG:HA	1.87	0.55
2:H:45:LEU:HD23	3:L:93:TYR:CZ	2.42	0.55
1:A:57:GLU:OE2	1:A:75:ARG:NH1	2.40	0.55
1:A:461:GLN:NE2	1:A:462:GLU:OE1	2.39	0.55
1:A:881:VAL:N	1:A:905:PHE:O	2.37	0.55
1:A:1017:SER:N	1:A:1036:VAL:O	2.40	0.55
1:A:2769:PHE:HD1	1:A:2799:SER:HB3	1.72	0.55
1:A:2958:GLY:HA2	1:A:2975:VAL:HA	1.87	0.55
1:A:3192:VAL:HG21	1:A:3843:VAL:HG22	1.88	0.55
1:A:3498:GLY:N	1:A:3513:ILE:O	2.36	0.55
1:A:3519:THR:HA	1:A:3528:SER:HA	1.89	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3919:SER:HB3	1:A:3924:LEU:HB2	1.88	0.55
5:R:284:CYS:HB3	5:R:288:GLU:N	2.22	0.55
1:A:52:TYR:N	1:A:82:LEU:O	2.36	0.55
1:A:170:THR:HG21	1:A:175:GLN:HG2	1.89	0.55
1:A:363:VAL:HG21	1:A:389:GLN:HB2	1.88	0.55
1:A:575:ASN:HA	1:A:618:ALA:HB1	1.89	0.55
1:A:2973:ASN:N	1:A:2989:GLN:O	2.40	0.55
1:A:3388:THR:OG1	1:A:3394:LYS:O	2.25	0.55
1:A:3438:MET:HG2	1:A:3460:PHE:HE1	1.71	0.55
1:A:82:LEU:HD22	1:A:164:LEU:HD13	1.89	0.55
1:A:413:TYR:HA	1:A:444:ALA:HB2	1.89	0.55
1:A:900:GLN:OE1	1:A:900:GLN:N	2.40	0.55
1:A:1407:SER:OG	1:A:1421:SER:O	2.24	0.55
1:A:1993:SER:O	1:A:1994:GLN:NE2	2.40	0.55
1:A:2069:ILE:O	1:A:2749:THR:OG1	2.25	0.55
1:A:2728:LEU:HD12	1:A:2731:PHE:HB2	1.89	0.55
1:A:3016:GLU:HA	1:A:3040:SER:HA	1.89	0.55
3:L:20:THR:HA	3:L:80:THR:HA	1.89	0.55
1:A:128:ARG:NH2	1:A:152:TYR:OH	2.40	0.54
1:A:158:ARG:NH1	1:A:309:ALA:O	2.40	0.54
1:A:1984:LYS:HA	1:A:1993:SER:HA	1.90	0.54
1:A:3129:PRO:HA	1:A:3149:ASP:HA	1.88	0.54
1:A:3597:SER:HA	1:A:3622:LEU:O	2.07	0.54
1:A:4063:ALA:HA	1:A:4066:LEU:HD23	1.88	0.54
1:A:4141:TYR:O	1:A:4145:LYS:N	2.37	0.54
4:B:325:ASN:O	4:B:329:GLY:N	2.41	0.54
1:A:588:GLN:HA	1:A:591:ASN:HB2	1.88	0.54
1:A:3559:ILE:H	1:A:3591:LEU:HB3	1.73	0.54
6:N:4:LEU:HB3	6:N:96:CYS:SG	2.47	0.54
6:N:12:VAL:HG21	6:N:18:LEU:HD23	1.89	0.54
5:R:324:GLY:O	5:R:351:ARG:NH1	2.38	0.54
1:A:175:GLN:HE22	1:A:177:LEU:HB2	1.72	0.54
1:A:833:GLU:OE1	1:A:851:SER:HB3	2.07	0.54
1:A:959:ASN:ND2	1:A:987:THR:OG1	2.40	0.54
1:A:960:ARG:HA	1:A:982:SER:HA	1.89	0.54
1:A:1961:SER:OG	1:A:1988:ASN:O	2.25	0.54
1:A:3656:LYS:HD3	1:A:3709:VAL:HG23	1.90	0.54
1:A:436:GLN:HE21	1:A:441:THR:HG21	1.73	0.54
1:A:1555:ILE:HG13	1:A:1576:GLY:HA2	1.88	0.54
1:A:1872:ILE:HA	1:A:1877:SER:HA	1.88	0.54
1:A:4517:SER:HA	1:A:4520:LEU:HD12	1.88	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
4:B:11:ILE:HB	4:B:37:VAL:HG13	1.89	0.54
4:B:69:PHE:HA	4:B:72:TYR:HD2	1.71	0.54
1:A:1588:ASP:HB2	1:A:1599:ARG:HB3	1.89	0.54
1:A:1597:LEU:HD12	1:A:1618:SER:HB3	1.89	0.54
1:A:3380:LYS:NZ	1:A:3381:LEU:O	2.40	0.54
1:A:3715:ASN:ND2	1:A:3804:GLU:O	2.41	0.54
1:A:4550:PRO:O	1:A:4553:LYS:NZ	2.41	0.54
4:B:224:THR:HG22	4:B:226:MET:H	1.72	0.54
1:A:581:LEU:HD13	1:A:593:VAL:HB	1.90	0.54
1:A:757:SER:HA	1:A:760:LYS:HE2	1.88	0.54
1:A:1455:PHE:HB3	1:A:1467:ALA:O	2.08	0.54
1:A:1483:GLU:HA	1:A:1504:SER:HA	1.88	0.54
1:A:3413:THR:HG22	1:A:3414:VAL:H	1.73	0.54
1:A:3433:ILE:HG22	1:A:3435:ILE:H	1.72	0.54
1:A:4003:SER:N	1:A:4007:GLY:O	2.40	0.54
1:A:4482:ILE:HA	1:A:4485:LYS:HD2	1.90	0.54
4:B:119:TYR:O	4:B:245:GLY:N	2.24	0.54
4:B:121:LYS:HE2	4:B:243:ASN:HB2	1.90	0.54
5:I:453:SER:O	5:I:468:VAL:N	2.41	0.54
1:A:103:TYR:HB3	1:A:114:LYS:HD3	1.90	0.54
1:A:486:TYR:HA	1:A:489:LEU:HG	1.88	0.54
1:A:2946:ILE:HA	1:A:2959:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:3562:LEU:HD13	1:A:3588:THR:HG22	1.89	0.54
1:A:3603:HIS:HA	1:A:3617:GLY:HA2	1.90	0.54
1:A:3808:ILE:HD12	1:A:3874:GLY:HA3	1.89	0.54
1:A:4131:GLN:NE2	1:A:4478:LYS:O	2.38	0.54
5:I:496:GLY:HA2	5:I:519:PRO:HD3	1.88	0.54
1:A:340:GLN:HE21	1:A:342:ILE:HB	1.73	0.54
1:A:1849:ALA:O	1:A:1872:ILE:N	2.32	0.54
1:A:3234:LYS:HG3	1:A:3304:LEU:HD13	1.89	0.54
2:H:19:ARG:NH2	4:B:444:GLN:OE1	2.41	0.54
3:L:151:VAL:HG22	3:L:202:THR:H	1.73	0.54
4:B:246:VAL:HB	4:B:318:ARG:HA	1.90	0.54
5:I:574:ARG:HG3	5:I:587:SER:HB2	1.89	0.54
6:N:3:GLN:O	6:N:25:SER:N	2.40	0.54
1:A:569:PRO:HG2	1:A:574:ILE:HD11	1.90	0.54
1:A:968:GLN:NE2	1:A:970:PHE:O	2.40	0.54
1:A:1185:ASP:HA	1:A:1276:ASN:HB3	1.90	0.54
1:A:1288:THR:O	1:A:1354:GLY:N	2.41	0.54
1:A:1557:ASN:HB3	1:A:1574:THR:HA	1.90	0.54
1:A:1757:LEU:HA	1:A:1766:PHE:HB2	1.90	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1942:PHE:HB3	1:A:1944:HIS:HE1	1.73	0.54
1:A:2012:ARG:NH1	1:A:2054:ILE:H	2.02	0.54
1:A:3407:GLU:H	1:A:3431:ALA:HB2	1.72	0.54
1:A:3454:VAL:O	1:A:3483:LEU:N	2.39	0.54
1:A:3864:ILE:HD12	1:A:3865:PRO:HD2	1.89	0.54
1:A:4040:LYS:NZ	1:A:4059:GLU:OE1	2.40	0.54
1:A:248:THR:N	1:A:258:GLU:O	2.36	0.54
1:A:259:ALA:O	1:A:286:LEU:N	2.41	0.54
1:A:496:GLY:N	1:A:533:LYS:HZ1	2.06	0.54
1:A:923:LYS:NZ	1:A:1040:GLU:OE1	2.41	0.54
1:A:1453:LEU:HB3	1:A:1469:VAL:HG23	1.89	0.54
4:B:341:PHE:HD1	4:B:370:ILE:HG12	1.73	0.54
1:A:889:ILE:N	1:A:897:SER:OG	2.41	0.53
1:A:1459:SER:H	1:A:1464:GLN:HE21	1.54	0.53
1:A:3005:LYS:O	1:A:3018:THR:OG1	2.17	0.53
1:A:3247:GLN:NE2	1:A:3266:GLU:OE2	2.40	0.53
4:B:61:ILE:HG12	4:B:63:PHE:HE1	1.73	0.53
4:B:157:TYR:HA	4:B:260:PHE:HD2	1.74	0.53
1:A:346:ASN:HA	1:A:349:ASN:HD22	1.73	0.53
4:B:18:GLY:O	4:B:22:LEU:N	2.32	0.53
6:N:36:TRP:HA	6:N:96:CYS:HA	1.88	0.53
6:N:67:ARG:NH2	6:N:85:SER:O	2.29	0.53
1:A:240:SER:HB3	1:A:264:GLN:HE22	1.73	0.53
1:A:714:SER:HA	1:A:717:LYS:HD3	1.90	0.53
1:A:1016:VAL:HG23	1:A:1037:THR:HA	1.91	0.53
1:A:1643:ALA:HA	1:A:1656:ALA:HA	1.90	0.53
1:A:2088:ILE:O	1:A:2092:LEU:N	2.34	0.53
1:A:151:THR:HA	1:A:154:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:253:ARG:HD3	1:A:255:HIS:CE1	2.44	0.53
1:A:463:LEU:O	1:A:467:ALA:N	2.40	0.53
1:A:879:VAL:HG12	1:A:907:HIS:CE1	2.44	0.53
1:A:1508:ASP:O	1:A:1512:GLY:N	2.38	0.53
1:A:2458:GLU:O	1:A:2461:GLN:HG3	2.09	0.53
1:A:3351:ASN:OD1	1:A:3369:SER:N	2.41	0.53
4:B:84:ASP:N	4:B:84:ASP:OD1	2.41	0.53
1:A:1575:ASN:HB3	1:A:1577:LYS:HE3	1.91	0.53
1:A:1930:LYS:O	1:A:1945:ASP:N	2.42	0.53
1:A:3369:SER:HB2	1:A:3380:LYS:HD2	1.89	0.53
3:L:89:LEU:HD13	3:L:173:SER:HB3	1.91	0.53
3:L:92:TYR:HE1	3:L:109:LEU:HB2	1.73	0.53
4:B:375:THR:OG1	4:B:378:GLN:OE1	2.25	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:I:532:TYR:CE2	5:I:568:LEU:HD22	2.43	0.53
1:A:183:TYR:OH	1:A:844:LEU:O	2.18	0.53
1:A:1036:VAL:HG13	1:A:1046:GLU:HB2	1.89	0.53
1:A:3595:GLN:OE1	1:A:3624:ALA:N	2.39	0.53
1:A:3677:LEU:HD12	1:A:3680:TYR:HB2	1.90	0.53
1:A:4503:SER:O	1:A:4507:SER:OG	2.26	0.53
4:B:258:LYS:HG3	4:B:330:GLU:OE1	2.08	0.53
5:R:328:VAL:HG23	5:R:341:PRO:HG3	1.91	0.53
1:A:1120:ILE:HB	1:A:1137:ILE:HB	1.91	0.53
1:A:1132:GLU:O	1:A:1134:ARG:NH1	2.42	0.53
1:A:1568:LEU:O	1:A:1591:PHE:N	2.40	0.53
1:A:1842:ILE:HG23	1:A:1851:TYR:CD1	2.43	0.53
1:A:1945:ASP:HB2	1:A:1967:LYS:HD2	1.90	0.53
4:B:379:ARG:HA	4:B:382:PHE:HB2	1.90	0.53
5:I:402:PHE:HA	5:I:411:LYS:HA	1.90	0.53
1:A:343:GLN:HG3	1:A:347:LEU:HG	1.89	0.53
1:A:1607:GLU:O	1:A:1635:LYS:NZ	2.42	0.53
1:A:2931:TRP:NE1	1:A:2933:CYS:SG	2.81	0.53
6:N:62:ASP:HA	6:N:65:LYS:HB2	1.90	0.53
1:A:689:GLU:HB3	1:A:778:ARG:HB2	1.91	0.53
1:A:1661:LYS:HD2	1:A:1666:VAL:HG13	1.90	0.53
1:A:2762:LEU:HD12	1:A:2764:ILE:HD11	1.90	0.53
1:A:3726:LEU:HD12	1:A:3729:LYS:HB3	1.91	0.53
4:B:88:GLN:HA	4:B:96:TRP:CZ2	2.43	0.53
4:B:99:VAL:HG11	4:B:107:ALA:HB3	1.91	0.53
4:B:388:ASP:OD1	4:B:389:ASP:N	2.38	0.53
1:A:205:THR:HB	1:A:247:TYR:CE1	2.44	0.53
1:A:600:ILE:HG12	1:A:608:ILE:HD13	1.90	0.53
1:A:1034:LYS:HG3	1:A:1050:THR:HG22	1.91	0.53
1:A:1504:SER:OG	1:A:1506:GLN:NE2	2.40	0.53
1:A:1703:ALA:HA	1:A:1708:LEU:HD13	1.91	0.53
1:A:1716:ALA:O	1:A:1724:LYS:NZ	2.33	0.53
1:A:2790:ALA:HB1	1:A:2813:GLN:HE21	1.74	0.53
1:A:3656:LYS:NZ	1:A:3710:TYR:O	2.37	0.53
2:H:206:CYS:O	2:H:219:LYS:N	2.42	0.53
4:B:66:HIS:CG	4:B:98:ALA:HB1	2.44	0.53
5:I:520:ARG:HB3	5:I:564:ASN:O	2.10	0.53
1:A:187:SER:HG	1:A:189:HIS:CE1	2.27	0.52
1:A:349:ASN:O	1:A:353:THR:HG23	2.09	0.52
1:A:500:GLU:HG3	1:A:506:LEU:HD13	1.90	0.52
1:A:853:VAL:HB	1:A:882:GLU:HB2	1.91	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:972:GLY:N	1:A:1010:GLU:OE2	2.42	0.52
1:A:1358:LEU:N	1:A:1373:TYR:O	2.37	0.52
1:A:1806:LEU:HD21	1:A:1831:TYR:HD1	1.74	0.52
1:A:1871:ASP:O	1:A:1878:ALA:N	2.32	0.52
1:A:4089:HIS:O	1:A:4093:THR:OG1	2.16	0.52
2:H:38:ARG:NE	2:H:46:GLU:OE1	2.40	0.52
5:I:536:TRP:HA	5:I:563:PRO:HD2	1.92	0.52
1:A:556:ASP:HA	1:A:559:LEU:HB2	1.91	0.52
1:A:3632:ARG:NH1	1:A:3633:TRP:O	2.42	0.52
1:A:4040:LYS:HD3	1:A:4057:ASN:HB3	1.91	0.52
4:B:163:ILE:O	4:B:193:GLY:HA3	2.09	0.52
1:A:218:ILE:O	1:A:219:ARG:NE	2.42	0.52
1:A:1987:PHE:HB2	1:A:1992:TYR:HE2	1.74	0.52
1:A:2055:VAL:HG23	1:A:2765:GLN:H	1.74	0.52
1:A:2870:SER:HB3	1:A:2888:LYS:HD3	1.91	0.52
1:A:3468:MET:HG2	1:A:3469:LEU:HD23	1.91	0.52
2:H:36:TRP:NE1	2:H:79:LEU:HD11	2.23	0.52
5:R:176:GLY:O	5:R:180:TRP:N	2.42	0.52
1:A:443:TYR:O	1:A:447:HIS:N	2.37	0.52
1:A:489:LEU:HD13	1:A:530:ALA:HB2	1.92	0.52
1:A:616:LYS:HA	1:A:619:LEU:HG	1.92	0.52
1:A:2930:LYS:HD2	1:A:2938:ASP:HB2	1.91	0.52
1:A:2984:SER:HB2	1:A:3008:ALA:HB3	1.90	0.52
1:A:3637:VAL:HB	1:A:3644:PHE:HB3	1.90	0.52
1:A:345:ALA:HA	1:A:828:HIS:CE1	2.45	0.52
1:A:503:THR:HG23	1:A:506:LEU:HB2	1.91	0.52
1:A:1518:SER:O	1:A:1532:GLN:HB2	2.08	0.52
1:A:1844:SER:HA	1:A:1849:ALA:HA	1.91	0.52
1:A:1998:ALA:HA	1:A:2007:VAL:HG23	1.90	0.52
1:A:3020:ARG:HA	1:A:3036:SER:HA	1.92	0.52
1:A:3120:GLU:OE2	1:A:3169:PHE:N	2.37	0.52
1:A:3370:SER:N	1:A:3379:TYR:O	2.42	0.52
1:A:4523:LEU:HD12	1:A:4526:GLN:HE22	1.75	0.52
2:H:35:HIS:HE1	3:L:101:TRP:CZ2	2.27	0.52
3:L:69:THR:OG1	3:L:80:THR:O	2.27	0.52
4:B:98:ALA:HA	4:B:331:ILE:HG12	1.92	0.52
4:B:256:PRO:HB2	4:B:328:LYS:HE3	1.91	0.52
1:A:60:SER:HB2	1:A:889:ILE:HB	1.90	0.52
1:A:1054:ASN:ND2	1:A:1057:SER:H	2.07	0.52
1:A:2754:THR:HG23	1:A:2755:PHE:HD1	1.75	0.52
1:A:2902:SER:HB3	1:A:2931:TRP:HD1	1.73	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3934:HIS:HB3	1:A:3941:LEU:HD11	1.90	0.52
1:A:3946:LYS:NZ	1:A:3960:GLU:O	2.42	0.52
1:A:3999:THR:OG1	1:A:4011:MET:N	2.30	0.52
4:B:338:MET:HA	4:B:341:PHE:HB3	1.90	0.52
1:A:65:PRO:HD2	1:A:277:GLY:O	2.10	0.52
1:A:152:TYR:HA	1:A:155:ASN:HD21	1.75	0.52
1:A:182:VAL:HG13	1:A:183:TYR:CD1	2.45	0.52
1:A:447:HIS:CE1	1:A:784:LEU:HA	2.45	0.52
1:A:819:LYS:HG3	1:A:864:LEU:H	1.75	0.52
1:A:915:VAL:HG13	1:A:924:PHE:HA	1.90	0.52
1:A:1634:ASP:N	1:A:1637:ASN:O	2.42	0.52
1:A:3074:TYR:CD1	1:A:3087:TRP:HA	2.44	0.52
2:H:24:ALA:HB1	2:H:27:PHE:CE1	2.43	0.52
4:B:46:GLU:O	4:B:72:TYR:OH	2.16	0.52
5:R:302:CYS:HB2	5:R:307:ASP:HB2	1.91	0.52
5:R:337:GLU:HA	5:R:350:ARG:HH22	1.74	0.52
1:A:61:SER:HB3	1:A:281:GLN:HG2	1.92	0.52
1:A:1410:THR:HA	1:A:1420:LEU:HD13	1.91	0.52
1:A:1742:MET:N	1:A:1753:HIS:O	2.36	0.52
1:A:3177:TYR:CE1	1:A:3335:GLY:HA3	2.44	0.52
1:A:4540:LYS:O	1:A:4543:GLN:NE2	2.42	0.52
4:B:89:ASP:OD1	4:B:89:ASP:N	2.43	0.52
1:A:52:TYR:HE2	1:A:84:VAL:HG12	1.75	0.52
1:A:430:PHE:CZ	1:A:449:VAL:HG13	2.45	0.52
1:A:981:TYR:CE1	1:A:1001:LEU:HB2	2.45	0.52
1:A:1977:GLN:H	1:A:2000:ASN:HB3	1.75	0.52
1:A:4080:VAL:HA	1:A:4083:ASP:HB3	1.90	0.52
1:A:4546:THR:HB	1:A:4549:ASN:HA	1.92	0.52
4:B:507:ALA:HB3	4:B:533:PHE:HE2	1.73	0.52
1:A:149:GLU:HG2	1:A:154:LEU:HG	1.92	0.52
1:A:1537:TYR:HE1	1:A:1542:LEU:HD22	1.75	0.52
1:A:3188:ASN:HB3	1:A:3328:HIS:HA	1.92	0.52
1:A:3344:LYS:HZ1	5:R:164:LEU:HG	1.75	0.52
1:A:3440:PHE:HD1	1:A:3460:PHE:HB2	1.74	0.52
1:A:3927:GLU:O	1:A:3950:ALA:N	2.31	0.52
1:A:3928:LEU:HA	1:A:3949:PHE:HA	1.91	0.52
1:A:3959:GLU:N	1:A:3975:HIS:O	2.31	0.52
4:B:117:LEU:HB2	4:B:249:LEU:HA	1.92	0.52
4:B:233:ALA:O	4:B:237:ILE:N	2.22	0.52
5:R:248:CYS:O	5:R:253:ARG:NH1	2.43	0.52
1:A:45:ARG:HH22	1:A:190:PHE:HE2	1.58	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:225:LEU:HD23	1:A:830:ILE:HG22	1.93	0.51
1:A:1078:ARG:HB3	1:A:1095:ASP:HB2	1.91	0.51
1:A:1922:GLU:HG3	1:A:1953:HIS:HB2	1.92	0.51
1:A:2754:THR:HG23	1:A:2755:PHE:CD1	2.45	0.51
4:B:180:ILE:HG21	4:B:335:ILE:HG21	1.92	0.51
4:B:234:TRP:HZ3	4:B:302:GLY:HA3	1.75	0.51
4:B:444:GLN:HA	4:B:447:LYS:HB2	1.90	0.51
5:I:469:ILE:HD13	5:I:490:TRP:CE3	2.45	0.51
5:I:555:LEU:HG	5:I:556:VAL:HG23	1.92	0.51
1:A:584:GLU:OE1	1:A:586:ASN:N	2.43	0.51
1:A:1094:LEU:H	1:A:1110:LEU:HB3	1.75	0.51
1:A:1164:ARG:H	1:A:1179:ASN:HB3	1.74	0.51
1:A:1619:LEU:HA	1:A:1624:LEU:HA	1.92	0.51
1:A:1722:ASP:HB3	1:A:1745:SER:H	1.75	0.51
1:A:1777:ASP:HB2	1:A:1804:ASN:HA	1.92	0.51
1:A:1894:ASN:HA	1:A:1911:THR:HA	1.92	0.51
1:A:1913:GLY:N	1:A:1927:LEU:O	2.34	0.51
1:A:2413:ILE:O	1:A:2417:ASN:ND2	2.41	0.51
1:A:2437:ASP:OD1	1:A:2437:ASP:N	2.43	0.51
1:A:3143:THR:OG1	1:A:3144:THR:N	2.43	0.51
4:B:21:GLY:HA3	4:B:295:VAL:HA	1.92	0.51
4:B:99:VAL:HB	4:B:106:ILE:HB	1.92	0.51
4:B:157:TYR:OH	4:B:262:GLY:N	2.43	0.51
4:B:274:ASN:O	4:B:278:ALA:N	2.38	0.51
4:B:434:LEU:HD22	4:B:467:GLN:NE2	2.25	0.51
5:I:579:ASP:HB2	5:I:582:LEU:O	2.09	0.51
1:A:179:LEU:HB2	1:A:188:THR:HG21	1.91	0.51
1:A:1749:MET:HA	1:A:1774:TYR:HA	1.92	0.51
2:H:7:SER:N	2:H:21:SER:O	2.43	0.51
2:H:36:TRP:CE2	2:H:81:LEU:HD22	2.44	0.51
3:L:42:TYR:N	3:L:93:TYR:O	2.43	0.51
4:B:141:LEU:HB3	4:B:148:ALA:HB2	1.92	0.51
5:I:574:ARG:NE	5:I:587:SER:OG	2.43	0.51
1:A:179:LEU:HA	8:A:4602:NAG:H82	1.92	0.51
1:A:645:LEU:HB2	1:A:648:LEU:HB3	1.92	0.51
1:A:694:GLY:HA2	1:A:773:ALA:HB2	1.93	0.51
1:A:763:LYS:O	1:A:767:SER:OG	2.28	0.51
1:A:1542:LEU:HD23	1:A:1563:TYR:HD2	1.75	0.51
1:A:1584:SER:N	1:A:1603:GLN:O	2.43	0.51
1:A:2464:GLU:O	1:A:2468:LEU:N	2.44	0.51
1:A:2884:ASP:HA	1:A:2911:LYS:HA	1.93	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3559:ILE:HG22	1:A:3591:LEU:HB2	1.92	0.51
1:A:3668:HIS:CD2	1:A:3670:ARG:HD2	2.44	0.51
4:B:378:GLN:OE1	4:B:378:GLN:N	2.40	0.51
1:A:574:ILE:HD13	1:A:615:VAL:HG22	1.92	0.51
1:A:584:GLU:O	1:A:590:LYS:NZ	2.34	0.51
1:A:667:LEU:HB2	1:A:698:GLU:HB3	1.93	0.51
1:A:1128:ARG:O	1:A:1130:GLN:NE2	2.43	0.51
1:A:1755:ASN:HB3	1:A:1766:PHE:HE1	1.75	0.51
1:A:2779:ASN:ND2	1:A:2788:GLY:O	2.41	0.51
1:A:3084:GLN:HE22	1:A:3086:SER:HB2	1.75	0.51
1:A:3247:GLN:HG3	1:A:3264:THR:HA	1.92	0.51
1:A:3418:THR:OG1	1:A:3419:LYS:N	2.43	0.51
1:A:3902:LEU:HA	1:A:3911:THR:HA	1.93	0.51
4:B:431:MET:N	4:B:431:MET:SD	2.83	0.51
1:A:53:THR:HA	1:A:81:GLU:HA	1.92	0.51
1:A:183:TYR:OH	1:A:846:LEU:HD23	2.11	0.51
1:A:218:ILE:HG13	1:A:836:PHE:HA	1.92	0.51
1:A:676:THR:HA	1:A:687:LEU:H	1.75	0.51
1:A:1036:VAL:HG12	1:A:1038:GLN:HG3	1.92	0.51
1:A:1107:MET:HB3	1:A:1123:VAL:HB	1.93	0.51
1:A:1570:LEU:N	1:A:1589:MET:O	2.39	0.51
1:A:1849:ALA:HB1	1:A:1851:TYR:CZ	2.45	0.51
1:A:3583:HIS:HA	1:A:3604:ALA:HA	1.91	0.51
2:H:162:VAL:HA	2:H:208:VAL:HG12	1.92	0.51
3:L:3:MET:HA	3:L:102:THR:HG21	1.93	0.51
4:B:506:THR:O	4:B:510:ALA:N	2.42	0.51
5:I:540:ALA:HB1	5:I:561:GLN:HA	1.92	0.51
1:A:235:LEU:HD23	1:A:238:LEU:HD21	1.92	0.51
1:A:548:PHE:CE2	1:A:577:ILE:HG12	2.46	0.51
1:A:1947:LYS:NZ	1:A:1966:HIS:O	2.43	0.51
1:A:2464:GLU:HA	1:A:2467:LYS:HE2	1.92	0.51
5:R:117:HIS:ND1	5:R:136:ASP:OD2	2.44	0.51
1:A:367:LEU:HD11	1:A:393:HIS:CD2	2.46	0.51
1:A:971:PRO:O	1:A:1014:TYR:OH	2.27	0.51
1:A:1362:VAL:HG22	1:A:1369:TRP:CE3	2.46	0.51
1:A:2012:ARG:HH22	1:A:2054:ILE:HG22	1.76	0.51
1:A:3468:MET:SD	1:A:3468:MET:N	2.82	0.51
5:I:477:ASP:HB3	5:I:518:LYS:HE2	1.91	0.51
5:R:136:ASP:OD2	5:R:138:SER:OG	2.28	0.51
5:R:252:SER:HB3	5:R:289:CYS:HB2	1.93	0.51
1:A:1034:LYS:HA	1:A:1050:THR:HA	1.92	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1162:SER:O	1:A:1179:ASN:ND2	2.44	0.51
1:A:1391:MET:SD	1:A:1404:VAL:HB	2.51	0.51
4:B:61:ILE:HD11	4:B:266:ALA:HB1	1.93	0.51
6:N:82:GLN:OE1	6:N:84:ASN:ND2	2.32	0.51
1:A:54:TYR:HB2	1:A:80:VAL:HG13	1.93	0.51
1:A:177:LEU:O	1:A:188:THR:N	2.44	0.51
1:A:347:LEU:O	1:A:351:LEU:N	2.33	0.51
1:A:1104:VAL:HG12	1:A:1127:PRO:HD2	1.92	0.51
1:A:1449:SER:O	1:A:1473:SER:N	2.37	0.51
1:A:1729:PHE:HA	1:A:1738:LEU:HA	1.93	0.51
1:A:1938:LEU:HB2	1:A:2428:LYS:HD2	1.93	0.51
1:A:3582:GLU:N	1:A:3605:SER:O	2.35	0.51
1:A:3945:THR:HB	1:A:3960:GLU:HB3	1.93	0.51
2:H:30:SER:O	2:H:53:SER:HB2	2.11	0.51
5:I:445:ASP:OD1	5:I:447:SER:OG	2.30	0.51
1:A:934:LYS:HB3	1:A:937:SER:HB2	1.93	0.50
1:A:1586:LYS:HD2	1:A:1586:LYS:O	2.09	0.50
1:A:1706:THR:OG1	1:A:1733:GLN:OE1	2.28	0.50
1:A:1865:SER:OG	1:A:1884:ASN:O	2.24	0.50
1:A:1914:ASN:HB2	1:A:1916:LYS:NZ	2.26	0.50
1:A:2852:GLY:O	1:A:2875:VAL:N	2.39	0.50
1:A:3916:THR:HG22	1:A:3927:GLU:HG3	1.93	0.50
1:A:3921:VAL:HG12	1:A:3923:PHE:H	1.76	0.50
1:A:4124:ASP:HA	1:A:4127:ASP:HB3	1.93	0.50
2:H:52:SER:OG	2:H:56:THR:N	2.44	0.50
4:B:422:GLN:HA	4:B:425:PHE:HB2	1.91	0.50
4:B:514:TYR:HA	4:B:517:ASP:HB3	1.93	0.50
4:B:518:ASN:O	4:B:518:ASN:ND2	2.43	0.50
5:I:564:ASN:H	5:I:579:ASP:HA	1.76	0.50
1:A:56:TYR:N	1:A:78:CYS:O	2.44	0.50
1:A:1150:MET:HB2	1:A:1165:VAL:HG12	1.92	0.50
1:A:1157:TYR:HB3	1:A:1188:LYS:HB3	1.93	0.50
1:A:1480:PHE:HB3	1:A:1507:ARG:HE	1.76	0.50
1:A:1614:LEU:N	1:A:1629:ASP:OD1	2.43	0.50
1:A:2852:GLY:N	1:A:2875:VAL:O	2.35	0.50
1:A:3099:ASN:OD1	1:A:3100:GLN:N	2.44	0.50
8:A:4604:NAG:H3	8:A:4604:NAG:H83	1.92	0.50
2:H:33:GLY:O	2:H:99:ARG:N	2.45	0.50
4:B:349:VAL:O	4:B:353:ALA:N	2.30	0.50
4:B:467:GLN:N	4:B:467:GLN:OE1	2.45	0.50
4:B:514:TYR:O	4:B:518:ASN:N	2.32	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:I:500:VAL:HG11	5:I:547:LEU:HA	1.93	0.50
6:N:35:GLY:N	6:N:97:ALA:O	2.37	0.50
5:R:329:CYS:HA	5:R:338:CYS:HA	1.93	0.50
1:A:69:ASP:N	1:A:69:ASP:OD1	2.42	0.50
1:A:92:LEU:HD11	1:A:160:ILE:HB	1.92	0.50
1:A:945:VAL:HA	1:A:950:THR:HA	1.93	0.50
1:A:1432:ASP:N	1:A:1458:SER:OG	2.37	0.50
1:A:1799:SER:N	1:A:1810:ASN:O	2.44	0.50
1:A:2057:PHE:HE1	1:A:2763:LYS:H	1.59	0.50
1:A:3918:SER:HA	1:A:3925:GLU:HA	1.94	0.50
1:A:3976:LEU:O	1:A:3989:ARG:NH1	2.44	0.50
4:B:19:TYR:O	4:B:23:ALA:N	2.38	0.50
1:A:97:CYS:HB3	1:A:126:MET:HG2	1.93	0.50
1:A:121:GLU:HA	1:A:124:ALA:HB3	1.94	0.50
1:A:363:VAL:HG23	1:A:393:HIS:HE1	1.77	0.50
1:A:1104:VAL:HG11	1:A:1126:ILE:HG23	1.94	0.50
1:A:1159:SER:OG	1:A:1185:ASP:OD1	2.18	0.50
1:A:1984:LYS:HD2	1:A:1993:SER:HB3	1.92	0.50
1:A:3182:HIS:CG	1:A:3360:SER:HB3	2.47	0.50
4:B:151:PHE:HB3	4:B:227:THR:HG23	1.93	0.50
4:B:341:PHE:O	4:B:345:VAL:HG12	2.12	0.50
4:B:379:ARG:O	4:B:383:ILE:N	2.39	0.50
1:A:1681:SER:HA	1:A:1703:ALA:H	1.77	0.50
1:A:1985:THR:O	1:A:1992:TYR:N	2.35	0.50
1:A:2003:ASP:OD1	1:A:2003:ASP:N	2.44	0.50
1:A:2866:THR:HB	1:A:2892:LYS:H	1.76	0.50
1:A:3976:LEU:HB3	1:A:3988:LEU:HB2	1.92	0.50
4:B:152:ASN:HD21	4:B:154:GLN:HE21	1.57	0.50
4:B:194:LEU:HB3	4:B:359:VAL:HG21	1.94	0.50
1:A:221:GLY:O	1:A:356:ARG:NH1	2.45	0.50
1:A:1423:ASP:HA	1:A:1437:PHE:O	2.11	0.50
1:A:1584:SER:OG	1:A:1603:GLN:HB3	2.11	0.50
1:A:1659:ASN:HB2	1:A:1668:GLU:HG2	1.94	0.50
1:A:2760:SER:N	1:A:2775:ALA:O	2.45	0.50
1:A:3876:VAL:HG12	1:A:3878:PRO:HD3	1.94	0.50
1:A:3987:HIS:HB2	1:A:4002:ALA:HB3	1.93	0.50
1:A:4073:ASN:O	1:A:4077:ALA:N	2.36	0.50
4:B:22:LEU:HD23	4:B:295:VAL:HG11	1.94	0.50
5:I:473:ILE:HB	5:I:493:SER:HB3	1.94	0.50
6:N:38:ARG:HB2	6:N:94:TYR:CZ	2.47	0.50
1:A:83:GLU:O	1:A:91:ILE:N	2.33	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:601:LEU:HD21	1:A:619:LEU:HD21	1.94	0.50
1:A:1389:TYR:CZ	1:A:1406:GLY:HA3	2.47	0.50
1:A:1439:HIS:CE1	1:A:1453:LEU:HB2	2.47	0.50
1:A:1537:TYR:CE1	1:A:1542:LEU:HD22	2.47	0.50
1:A:1961:SER:O	1:A:1988:ASN:N	2.44	0.50
1:A:2079:GLU:OE1	1:A:2083:ARG:NE	2.39	0.50
1:A:2808:PHE:HB2	1:A:2830:PHE:CD1	2.46	0.50
1:A:2835:LEU:HD22	1:A:2860:LEU:HD13	1.94	0.50
4:B:141:LEU:HG	4:B:146:LYS:HB2	1.94	0.50
5:I:519:PRO:HA	5:I:535:ASP:HA	1.94	0.50
5:I:547:LEU:HD22	5:I:666:TRP:CD1	2.46	0.50
5:I:583:HIS:N	5:I:602:GLU:OE2	2.44	0.50
1:A:321:GLN:NE2	1:A:894:PHE:O	2.27	0.50
1:A:828:HIS:HA	1:A:855:ALA:HA	1.93	0.50
1:A:1570:LEU:HD11	1:A:1572:SER:HB2	1.94	0.50
1:A:1693:HIS:HB3	1:A:1717:MET:O	2.10	0.50
1:A:2821:PRO:HG3	1:A:2846:PHE:HE1	1.77	0.50
1:A:3188:ASN:H	1:A:3329:ILE:H	1.58	0.50
1:A:3429:THR:HB	1:A:3440:PHE:HB3	1.93	0.50
4:B:425:PHE:CG	5:R:86:PHE:HE2	2.30	0.50
5:I:436:VAL:HG22	5:I:437:ALA:H	1.77	0.50
1:A:665:ASN:HD22	1:A:699:PRO:HD3	1.76	0.50
1:A:1658:THR:O	1:A:1669:ASN:N	2.41	0.50
1:A:1743:MET:HG3	1:A:1752:ASP:HA	1.94	0.50
1:A:3913:LEU:O	1:A:3930:VAL:N	2.25	0.50
4:B:154:GLN:O	4:B:346:ARG:NH1	2.44	0.50
5:I:616:ASP:HA	5:I:633:ARG:HB3	1.94	0.50
5:R:153:PHE:N	5:R:161:ILE:O	2.44	0.50
5:R:290:ILE:O	5:R:290:ILE:HG13	2.12	0.50
5:R:336:TYR:O	5:R:350:ARG:NH2	2.45	0.50
1:A:673:LEU:N	1:A:690:ILE:O	2.45	0.49
1:A:1633:THR:HA	1:A:1638:SER:HA	1.94	0.49
1:A:1699:LEU:HG	1:A:1712:SER:HA	1.94	0.49
1:A:1707:GLU:HA	1:A:1731:VAL:O	2.12	0.49
1:A:2813:GLN:H	1:A:2825:LYS:HB2	1.77	0.49
1:A:3375:ASP:HA	1:A:3378:GLN:HB3	1.94	0.49
1:A:3422:GLU:HG2	1:A:3447:ASN:HB2	1.94	0.49
1:A:3550:PHE:HA	1:A:3563:TRP:HA	1.94	0.49
1:A:4102:SER:O	1:A:4106:ARG:NH1	2.45	0.49
2:H:36:TRP:N	2:H:49:ALA:O	2.45	0.49
2:H:134:LEU:N	2:H:149:GLY:O	2.36	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:I:517:SER:HB2	5:I:535:ASP:OD1	2.12	0.49
5:I:560:ILE:HD13	5:I:577:TRP:HE1	1.77	0.49
6:N:34:MET:HA	6:N:98:ALA:HA	1.93	0.49
1:A:564:MET:HE3	1:A:567:ARG:HB3	1.94	0.49
1:A:908:GLU:N	1:A:934:LYS:O	2.44	0.49
1:A:938:GLY:N	1:A:1001:LEU:O	2.45	0.49
1:A:1134:ARG:NH2	1:A:1155:THR:HG23	2.27	0.49
1:A:1686:THR:N	1:A:1697:PHE:O	2.44	0.49
1:A:2432:TYR:OH	1:A:2724:PRO:O	2.30	0.49
1:A:3241:GLU:OE2	1:A:3244:ARG:NH1	2.44	0.49
5:I:480:ALA:O	5:I:500:VAL:HA	2.12	0.49
5:R:276:CYS:HB3	5:R:281:LYS:HB2	1.94	0.49
5:R:276:CYS:SG	5:R:289:CYS:N	2.85	0.49
1:A:238:LEU:HB2	1:A:269:PRO:HD3	1.93	0.49
1:A:412:THR:HA	1:A:415:VAL:HG12	1.94	0.49
1:A:656:GLU:O	1:A:658:ASN:ND2	2.45	0.49
1:A:662:ASP:OD2	1:A:664:ASN:ND2	2.44	0.49
1:A:1675:LEU:HD13	1:A:1680:ALA:HB2	1.93	0.49
1:A:2063:ASN:HA	1:A:2756:GLY:HA3	1.94	0.49
1:A:3482:SER:O	1:A:3492:ILE:HD12	2.12	0.49
1:A:3957:GLU:O	1:A:3977:ASN:N	2.36	0.49
1:A:4071:LYS:HD3	1:A:4525:ILE:HG23	1.95	0.49
4:B:490:GLY:HA2	4:B:536:THR:HA	1.93	0.49
5:I:444:SER:HA	5:I:476:PRO:HD2	1.94	0.49
1:A:83:GLU:HG2	1:A:91:ILE:HB	1.94	0.49
1:A:430:PHE:HE1	1:A:448:ALA:HB3	1.77	0.49
1:A:711:PHE:HB2	1:A:712:PRO:HD3	1.95	0.49
1:A:1981:TRP:HD1	1:A:1995:ASP:HA	1.76	0.49
1:A:3458:MET:HG3	1:A:3479:HIS:HB3	1.94	0.49
1:A:3633:TRP:HB3	1:A:3648:VAL:HG22	1.93	0.49
1:A:3780:ALA:HB2	1:A:3790:LYS:HD2	1.95	0.49
1:A:4038:ILE:HA	1:A:4059:GLU:HB2	1.94	0.49
4:B:218:ALA:O	4:B:224:THR:N	2.45	0.49
1:A:235:LEU:O	1:A:239:ILE:HG22	2.12	0.49
1:A:536:PRO:O	1:A:541:GLN:NE2	2.44	0.49
1:A:566:MET:HE2	1:A:596:HIS:HB3	1.93	0.49
1:A:2839:HIS:ND1	1:A:2855:ASN:O	2.46	0.49
1:A:2970:VAL:HG23	1:A:2972:GLN:HE22	1.77	0.49
1:A:3095:GLN:HG3	1:A:3122:ASN:HB2	1.93	0.49
3:L:167:SER:N	3:L:181:SER:O	2.33	0.49
4:B:66:HIS:CE1	4:B:332:MET:HB2	2.47	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
4:B:87:PHE:CE1	4:B:90:LYS:HD3	2.47	0.49
4:B:358:THR:HG22	4:B:360:ASP:H	1.78	0.49
1:A:144:TYR:HB3	1:A:302:GLY:HA3	1.94	0.49
1:A:836:PHE:CD2	1:A:848:ILE:HD13	2.47	0.49
1:A:1449:SER:H	1:A:1473:SER:HB2	1.78	0.49
1:A:1915:GLY:O	1:A:1925:GLY:N	2.45	0.49
1:A:3369:SER:HA	1:A:3380:LYS:HA	1.93	0.49
1:A:3772:LYS:O	1:A:3798:THR:N	2.43	0.49
4:B:210:THR:HG22	4:B:214:ILE:HD11	1.93	0.49
4:B:324:GLU:O	4:B:328:LYS:N	2.40	0.49
1:A:205:THR:HB	1:A:247:TYR:HE1	1.77	0.49
1:A:871:ALA:HB3	1:A:915:VAL:HB	1.95	0.49
1:A:2003:ASP:HB2	1:A:2064:GLN:HE21	1.78	0.49
1:A:2828:VAL:O	1:A:2838:GLU:HA	2.13	0.49
1:A:3440:PHE:CE1	1:A:3458:MET:HB2	2.45	0.49
4:B:508:GLU:O	4:B:512:LYS:HG2	2.13	0.49
5:R:236:CYS:HB2	5:R:242:GLN:HB2	1.94	0.49
5:R:294:LYS:HE2	5:R:297:ASN:HD21	1.78	0.49
5:R:300:ARG:NH2	5:R:304:ASP:O	2.45	0.49
1:A:57:GLU:CB	1:A:285:THR:H	2.25	0.49
1:A:659:LEU:HB3	1:A:668:PRO:HB3	1.95	0.49
1:A:799:LEU:O	1:A:803:ALA:N	2.43	0.49
1:A:1639:GLY:HA3	1:A:1661:LYS:H	1.78	0.49
1:A:1785:ASN:OD1	1:A:1787:GLN:NE2	2.43	0.49
1:A:1946:TYR:O	1:A:1966:HIS:N	2.39	0.49
1:A:4075:PRO:HG3	1:A:4521:ILE:HD13	1.94	0.49
3:L:27:GLN:OE1	6:N:118:GLN:HG2	2.12	0.49
1:A:128:ARG:HH12	1:A:153:ILE:HG21	1.77	0.49
1:A:329:LEU:HD11	1:A:370:LEU:HA	1.95	0.49
1:A:1132:GLU:O	1:A:1155:THR:N	2.46	0.49
1:A:1386:ARG:HA	1:A:1409:GLU:HA	1.93	0.49
1:A:1586:LYS:H	1:A:1601:GLU:HB3	1.78	0.49
1:A:1718:ILE:N	1:A:1721:VAL:HG12	2.28	0.49
1:A:3207:HIS:O	1:A:3211:ASN:ND2	2.44	0.49
1:A:3730:PHE:N	1:A:3770:ILE:O	2.40	0.49
1:A:3990:TYR:CE1	1:A:3999:THR:HG22	2.48	0.49
3:L:146:PRO:HA	3:L:178:TYR:HD2	1.77	0.49
6:N:14:ALA:HA	6:N:121:VAL:HG22	1.94	0.49
1:A:207:ARG:N	1:A:243:GLN:O	2.46	0.49
1:A:2927:GLY:O	1:A:2942:HIS:N	2.33	0.49
1:A:3586:LYS:HE2	1:A:3601:GLN:HB2	1.94	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3879:SER:O	1:A:3881:GLN:NE2	2.46	0.49
4:B:508:GLU:OE1	4:B:512:LYS:NZ	2.46	0.49
6:N:122:SER:OG	6:N:124:LEU:O	2.30	0.49
1:A:376:PRO:HG2	1:A:377:ILE:HD12	1.95	0.48
1:A:936:LEU:N	1:A:1003:LEU:O	2.36	0.48
1:A:1488:GLY:O	1:A:1499:GLY:N	2.44	0.48
1:A:1641:HIS:HE2	1:A:1643:ALA:HB2	1.77	0.48
2:H:5:VAL:O	2:H:23:ALA:N	2.45	0.48
4:B:131:TRP:CD1	4:B:252:PHE:HB2	2.48	0.48
4:B:371:MET:SD	4:B:404:ASN:ND2	2.85	0.48
1:A:253:ARG:HB3	1:A:255:HIS:ND1	2.28	0.48
1:A:545:LEU:HG	1:A:549:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:574:ILE:HA	1:A:577:ILE:HB	1.94	0.48
1:A:595:SER:HB3	1:A:627:VAL:HG11	1.95	0.48
1:A:1841:ALA:O	1:A:1852:LYS:N	2.44	0.48
1:A:2452:GLY:O	1:A:2455:GLN:NE2	2.47	0.48
1:A:2919:ILE:O	1:A:2950:ILE:N	2.44	0.48
1:A:3361:ASP:HA	1:A:3387:LEU:HD11	1.93	0.48
1:A:3456:SER:O	1:A:3481:LEU:N	2.44	0.48
2:H:209:ASN:OD1	2:H:210:HIS:N	2.46	0.48
4:B:335:ILE:O	4:B:338:MET:HE2	2.13	0.48
4:B:434:LEU:HB2	4:B:438:GLN:NE2	2.28	0.48
1:A:243:GLN:NE2	1:A:262:LYS:O	2.45	0.48
1:A:1556:LYS:O	1:A:1575:ASN:HB2	2.13	0.48
1:A:1682:MET:O	1:A:1701:GLY:N	2.46	0.48
1:A:1910:HIS:HB2	1:A:1930:LYS:HD3	1.95	0.48
1:A:2017:LEU:HD23	1:A:2050:GLN:HG3	1.95	0.48
1:A:3363:VAL:HA	1:A:3386:ARG:HA	1.95	0.48
1:A:3415:SER:OG	1:A:3416:LEU:N	2.46	0.48
1:A:3639:ILE:HG13	1:A:3642:GLY:H	1.77	0.48
2:H:23:ALA:HA	2:H:78:THR:HA	1.95	0.48
2:H:35:HIS:HB2	2:H:97:ALA:HB3	1.95	0.48
3:L:42:TYR:HA	3:L:51:LYS:O	2.13	0.48
6:N:3:GLN:N	6:N:25:SER:O	2.46	0.48
1:A:1450:LYS:HD3	1:A:1452:LEU:HD23	1.94	0.48
1:A:1905:MET:O	1:A:1935:ALA:N	2.42	0.48
1:A:3207:HIS:HA	1:A:3210:LYS:HE3	1.95	0.48
1:A:3547:LYS:HB2	1:A:3566:SER:HB3	1.96	0.48
1:A:3811:PHE:O	1:A:3870:SER:HA	2.13	0.48
4:B:112:VAL:HG23	4:B:303:ALA:HB1	1.95	0.48
4:B:207:ASN:ND2	4:B:209:ASP:OD1	2.46	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:I:638:ASP:OD2	5:I:640:ASN:ND2	2.44	0.48
6:N:71:SER:HG	6:N:80:TYR:HB2	1.79	0.48
1:A:346:ASN:HA	1:A:349:ASN:ND2	2.28	0.48
1:A:921:LYS:NZ	1:A:1016:VAL:O	2.45	0.48
1:A:1142:SER:H	1:A:1146:LEU:HD12	1.79	0.48
1:A:3196:PHE:HA	1:A:3199:GLN:HG2	1.95	0.48
1:A:3499:ASP:OD1	1:A:3501:LYS:NZ	2.38	0.48
5:I:479:LEU:HG	5:I:490:TRP:HA	1.94	0.48
5:I:536:TRP:HB2	5:I:562:TRP:CG	2.49	0.48
6:N:91:THR:HG21	6:N:121:VAL:HG12	1.96	0.48
1:A:56:TYR:CG	1:A:160:ILE:HG12	2.48	0.48
1:A:525:LYS:HZ3	1:A:556:ASP:HB3	1.78	0.48
1:A:1980:THR:OG1	1:A:1997:ASP:OD1	2.22	0.48
1:A:2808:PHE:HB2	1:A:2830:PHE:HD1	1.78	0.48
2:H:113:TRP:NE1	3:L:49:SER:HB2	2.22	0.48
3:L:20:THR:OG1	3:L:78:THR:OG1	2.26	0.48
5:I:564:ASN:N	5:I:578:VAL:O	2.47	0.48
1:A:1096:ILE:HB	1:A:1108:GLY:HA3	1.96	0.48
1:A:1546:SER:N	1:A:1559:ALA:O	2.46	0.48
1:A:3276:LYS:HZ2	1:A:3301:SER:H	1.60	0.48
1:A:3682:LYS:NZ	1:A:4092:HIS:O	2.39	0.48
1:A:3796:VAL:HG23	1:A:3814:THR:O	2.13	0.48
2:H:34:MET:SD	2:H:79:LEU:HB2	2.54	0.48
2:H:36:TRP:CZ2	2:H:96:CYS:HB3	2.49	0.48
4:B:25:VAL:HG11	4:B:286:LEU:HA	1.96	0.48
4:B:118:ILE:HG12	4:B:246:VAL:HG22	1.95	0.48
5:I:527:VAL:HB	5:I:570:LEU:HD11	1.94	0.48
1:A:160:ILE:HG23	1:A:286:LEU:HD11	1.96	0.48
1:A:190:PHE:HA	1:A:203:ILE:HD11	1.95	0.48
1:A:339:GLU:OE1	1:A:859:LYS:NZ	2.46	0.48
1:A:830:ILE:HD11	1:A:851:SER:HB2	1.95	0.48
1:A:2057:PHE:HE2	1:A:2761:ILE:HG23	1.78	0.48
1:A:2456:ALA:HA	1:A:2459:LEU:HG	1.95	0.48
1:A:3479:HIS:CD2	1:A:3496:THR:HG22	2.49	0.48
1:A:3536:SER:HB3	1:A:3544:LEU:HB3	1.95	0.48
2:H:71:SER:HB3	4:B:448:ASP:OD1	2.13	0.48
5:I:577:TRP:CH2	5:I:588:ILE:HB	2.49	0.48
1:A:59:GLU:HA	1:A:75:ARG:HA	1.96	0.48
1:A:265:HIS:HB2	1:A:280:ALA:HB3	1.96	0.48
1:A:341:ASN:HA	1:A:344:ARG:HB2	1.95	0.48
1:A:966:CYS:HA	1:A:976:CYS:HA	1.96	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1558:THR:HB	1:A:1573:ASP:HB3	1.96	0.48
1:A:1602:TYR:O	1:A:1612:PHE:HA	2.14	0.48
1:A:1612:PHE:HE2	1:A:1614:LEU:HB3	1.79	0.48
1:A:1693:HIS:CE1	1:A:1719:LEU:HG	2.49	0.48
1:A:2404:LEU:HD13	1:A:2407:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:2408:SER:N	1:A:2411:THR:OG1	2.44	0.48
1:A:3280:MET:HG2	1:A:3281:PRO:HD2	1.95	0.48
1:A:3410:HIS:CE1	1:A:3425:VAL:HG13	2.49	0.48
1:A:3638:ARG:NH1	1:A:3644:PHE:O	2.46	0.48
2:H:178:ALA:HB1	2:H:186:TYR:HB3	1.96	0.48
4:B:92:TYR:OH	4:B:323:MET:SD	2.71	0.48
5:I:532:TYR:OH	5:I:590:VAL:HA	2.14	0.48
5:R:214:TRP:CD1	5:R:221:ASP:HB2	2.49	0.48
1:A:145:PRO:HD2	1:A:304:LYS:HB2	1.95	0.48
1:A:220:THR:HG22	1:A:221:GLY:N	2.21	0.48
1:A:605:GLU:OE2	1:A:638:GLN:NE2	2.42	0.48
1:A:844:LEU:HD21	1:A:891:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:1683:LYS:HG3	1:A:1700:ASP:HB3	1.96	0.48
1:A:1709:SER:HB3	1:A:1730:LYS:HE3	1.96	0.48
1:A:2419:PHE:O	1:A:2423:LEU:HD13	2.14	0.48
1:A:2779:ASN:HB3	1:A:2789:ILE:HA	1.95	0.48
1:A:3601:GLN:NE2	1:A:3620:VAL:O	2.44	0.48
4:B:25:VAL:HG21	4:B:291:GLY:HA2	1.95	0.48
5:I:512:PHE:HZ	5:I:539:PRO:HG3	1.79	0.48
1:A:266:LEU:HA	1:A:278:MET:O	2.14	0.47
1:A:1146:LEU:H	1:A:1169:TYR:HB3	1.79	0.47
1:A:1897:ARG:HG2	1:A:2731:PHE:CE1	2.49	0.47
1:A:1944:HIS:N	1:A:1968:VAL:O	2.39	0.47
1:A:3334:MET:SD	1:A:3360:SER:HA	2.54	0.47
1:A:3417:THR:HG23	1:A:3853:PRO:HG2	1.96	0.47
3:L:144:PHE:N	3:L:178:TYR:O	2.38	0.47
4:B:396:ILE:HA	4:B:399:GLU:HB2	1.95	0.47
5:R:155:CYS:O	5:R:158:SER:N	2.46	0.47
1:A:59:GLU:O	1:A:282:VAL:HA	2.14	0.47
1:A:173:ALA:O	1:A:192:VAL:N	2.46	0.47
1:A:358:LEU:HD22	1:A:362:ALA:HB1	1.94	0.47
1:A:528:ILE:HG12	1:A:561:ALA:HB2	1.95	0.47
1:A:574:ILE:HG21	1:A:615:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:1056:GLN:O	1:A:1078:ARG:NH1	2.47	0.47
1:A:1888:ASP:OD1	1:A:1888:ASP:N	2.43	0.47
1:A:1896:PHE:HD1	1:A:1909:ALA:HB2	1.78	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2037:ILE:O	1:A:2043:ARG:NH1	2.47	0.47
1:A:3245:THR:HB	1:A:3247:GLN:HE22	1.79	0.47
1:A:3336:ASN:OD1	1:A:3358:ASN:HA	2.14	0.47
1:A:3386:ARG:NH1	1:A:3396:ALA:O	2.47	0.47
1:A:3532:LEU:HB3	1:A:3548:GLU:HB2	1.95	0.47
1:A:3650:LEU:HB2	1:A:3659:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:4516:GLU:OE2	1:A:4519:ARG:NH2	2.47	0.47
1:A:175:GLN:NE2	1:A:177:LEU:HB2	2.30	0.47
1:A:402:HIS:HB3	1:A:405:PRO:HG3	1.97	0.47
1:A:974:ASN:HB3	1:A:1006:ARG:HB3	1.96	0.47
1:A:1439:HIS:HA	1:A:1451:GLY:HA2	1.94	0.47
1:A:3126:LEU:HD21	1:A:3158:LEU:HD23	1.95	0.47
1:A:3213:ASN:HA	1:A:3216:LEU:HB2	1.96	0.47
1:A:3415:SER:H	1:A:3421:MET:CE	2.27	0.47
6:N:6:GLU:HB3	6:N:96:CYS:SG	2.54	0.47
5:R:244:SER:OG	5:R:263:ASP:OD2	2.27	0.47
1:A:335:LEU:HD13	1:A:826:PHE:CE2	2.50	0.47
1:A:1895:VAL:O	1:A:1910:HIS:N	2.47	0.47
1:A:2992:VAL:O	1:A:3000:SER:N	2.47	0.47
1:A:3562:LEU:HD23	5:R:310:ILE:HB	1.96	0.47
3:L:4:LEU:HD21	3:L:104:GLY:HA2	1.96	0.47
4:B:141:LEU:HD23	4:B:148:ALA:HA	1.95	0.47
4:B:373:ASN:HD21	4:B:404:ASN:HD22	1.62	0.47
1:A:439:ARG:HD3	1:A:786:PHE:O	2.15	0.47
1:A:639:LEU:N	1:A:655:ILE:O	2.47	0.47
1:A:827:LEU:N	1:A:856:PRO:O	2.47	0.47
1:A:1388:ARG:HB3	1:A:1408:GLY:H	1.80	0.47
1:A:3020:ARG:HH21	1:A:3034:LYS:HE2	1.80	0.47
1:A:3395:LEU:HA	5:R:214:TRP:CH2	2.49	0.47
1:A:3427:THR:HB	1:A:3442:GLN:HB3	1.95	0.47
1:A:3654:GLN:NE2	1:A:3715:ASN:OD1	2.48	0.47
1:A:3992:LYS:HB2	1:A:3997:ILE:HG12	1.95	0.47
2:H:20:LEU:HB2	2:H:81:LEU:HB3	1.96	0.47
4:B:141:LEU:HD21	4:B:225:ALA:HB3	1.97	0.47
4:B:281:PHE:CD2	4:B:282:LEU:HG	2.49	0.47
4:B:368:ILE:HG13	4:B:379:ARG:HG2	1.96	0.47
4:B:378:GLN:HG2	4:B:407:GLN:HE22	1.79	0.47
1:A:45:ARG:NH1	1:A:249:LEU:HG	2.28	0.47
1:A:174:LYS:HG2	1:A:191:THR:HG22	1.97	0.47
1:A:665:ASN:ND2	1:A:699:PRO:HD3	2.29	0.47
1:A:1112:CYS:HA	1:A:1117:GLU:O	2.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1417:THR:HA	1:A:1444:GLY:HA2	1.96	0.47
1:A:2836:ARG:HB2	1:A:2859:SER:HB3	1.96	0.47
1:A:3670:ARG:NH1	1:A:3671:PHE:HB3	2.29	0.47
2:H:60:TYR:CE2	2:H:69:THR:HA	2.49	0.47
4:B:231:PRO:HA	4:B:234:TRP:CE3	2.50	0.47
1:A:103:TYR:CE1	1:A:112:LEU:HB3	2.50	0.47
1:A:673:LEU:O	1:A:689:GLU:HA	2.15	0.47
1:A:829:TYR:HB3	1:A:854:ILE:HG13	1.96	0.47
1:A:887:MET:O	1:A:898:GLY:HA3	2.15	0.47
1:A:1973:THR:HG22	1:A:2738:ILE:HD12	1.94	0.47
1:A:2891:HIS:CD2	1:A:2893:LEU:HD23	2.45	0.47
1:A:3039:PHE:HD1	1:A:3048:ALA:HB2	1.80	0.47
1:A:3168:SER:OG	1:A:3345:SER:O	2.31	0.47
2:H:67:ARG:O	2:H:84:ASN:HB2	2.14	0.47
4:B:524:TRP:HA	4:B:535:VAL:HG22	1.97	0.47
5:I:583:HIS:CE1	5:I:606:ALA:HA	2.50	0.47
5:I:605:LEU:HG	5:I:620:TRP:CZ3	2.50	0.47
5:R:294:LYS:HA	5:R:297:ASN:ND2	2.30	0.47
1:A:581:LEU:HG	1:A:625:PRO:HG2	1.97	0.47
1:A:2920:ALA:HA	1:A:2949:THR:HA	1.96	0.47
1:A:3263:PHE:HD1	1:A:3281:PRO:HB3	1.80	0.47
1:A:4099:GLU:O	1:A:4103:LYS:N	2.45	0.47
2:H:58:LYS:HE3	4:B:451:SER:HB2	1.95	0.47
3:L:163:ASN:O	3:L:185:THR:N	2.42	0.47
4:B:487:VAL:HG13	4:B:496:GLU:HB3	1.97	0.47
5:I:648:SER:O	5:I:648:SER:OG	2.32	0.47
5:R:300:ARG:HH12	5:R:305:TRP:HB2	1.79	0.47
1:A:1030:VAL:HG12	1:A:1054:ASN:HB2	1.97	0.47
1:A:1630:ILE:O	1:A:1642:LYS:NZ	2.43	0.47
1:A:2799:SER:OG	1:A:2801:LEU:O	2.27	0.47
1:A:3278:VAL:HG23	1:A:3297:LEU:HB2	1.96	0.47
2:H:60:TYR:CZ	4:B:452:GLN:HG3	2.49	0.47
4:B:234:TRP:HA	4:B:237:ILE:HG22	1.97	0.47
6:N:19:ARG:NH2	6:N:71:SER:OG	2.48	0.47
1:A:37:LEU:N	5:I:447:SER:HB2	2.29	0.47
1:A:161:ILE:O	1:A:165:LEU:N	2.38	0.47
1:A:243:GLN:NE2	1:A:261:CYS:HB3	2.28	0.47
1:A:459:GLY:HA3	1:A:502:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:1850:SER:HA	1:A:1871:ASP:HA	1.97	0.47
1:A:2461:GLN:HA	1:A:2464:GLU:HG3	1.97	0.47
1:A:3527:ARG:NH2	5:R:310:ILE:HG12	2.30	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3919:SER:OG	1:A:3920:THR:N	2.48	0.47
1:A:4012:ASP:HB2	1:A:4025:TYR:HE1	1.80	0.47
2:H:89:GLU:OE1	2:H:89:GLU:N	2.43	0.47
3:L:4:LEU:HD13	3:L:23:CYS:SG	2.55	0.47
3:L:31:TYR:H	3:L:35:GLN:HA	1.78	0.47
3:L:125:PRO:HG3	3:L:136:SER:H	1.80	0.47
4:B:366:ALA:HA	4:B:369:LEU:HB2	1.97	0.47
5:I:438:SER:O	5:I:438:SER:OG	2.32	0.47
1:A:536:PRO:HG3	1:A:564:MET:HE2	1.97	0.46
1:A:634:SER:OG	1:A:659:LEU:O	2.26	0.46
1:A:688:ILE:HA	1:A:779:ILE:HG22	1.97	0.46
1:A:776:TYR:HB2	1:A:783:GLU:OE1	2.14	0.46
1:A:788:SER:N	1:A:791:ASP:HB2	2.29	0.46
1:A:874:VAL:HG12	1:A:912:GLU:HG3	1.97	0.46
1:A:1484:VAL:N	1:A:1503:LEU:O	2.49	0.46
1:A:1542:LEU:HD23	1:A:1563:TYR:CD2	2.49	0.46
1:A:1907:ILE:HB	1:A:1933:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:2017:LEU:HB3	1:A:2020:LEU:HD23	1.96	0.46
1:A:2881:LEU:O	1:A:2914:LEU:N	2.39	0.46
1:A:2974:LEU:HD23	1:A:2988:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:2990:SER:HB3	1:A:3002:LEU:HB2	1.97	0.46
1:A:3122:ASN:HA	1:A:3166:LYS:HA	1.97	0.46
1:A:3755:ASP:OD1	1:A:3755:ASP:N	2.46	0.46
1:A:3886:ARG:HD2	1:A:3899:SER:HB3	1.97	0.46
1:A:4068:THR:HG22	1:A:4529:HIS:HE2	1.79	0.46
2:H:62:ASP:HA	2:H:65:LYS:HB2	1.97	0.46
2:H:69:THR:HG22	2:H:82:GLN:HB3	1.97	0.46
4:B:7:GLY:N	4:B:274:ASN:OD1	2.47	0.46
4:B:64:TRP:O	4:B:265:SER:N	2.40	0.46
4:B:486:LEU:HD22	4:B:533:PHE:HD2	1.80	0.46
1:A:610:ASP:N	1:A:610:ASP:OD1	2.46	0.46
1:A:690:ILE:HD11	1:A:777:LEU:HD12	1.96	0.46
1:A:1922:GLU:O	1:A:1952:HIS:ND1	2.48	0.46
1:A:2012:ARG:HH12	1:A:2054:ILE:N	2.04	0.46
1:A:2080:TYR:HA	1:A:2083:ARG:HG2	1.96	0.46
1:A:2912:THR:HG23	1:A:2921:TRP:HA	1.98	0.46
1:A:3454:VAL:HB	1:A:3483:LEU:HB3	1.96	0.46
1:A:4501:ASP:OD2	1:A:4505:GLN:NE2	2.48	0.46
2:H:20:LEU:HD11	2:H:83:MET:HG2	1.97	0.46
4:B:484:TYR:N	4:B:499:THR:O	2.42	0.46
4:B:522:GLY:HA3	4:B:537:GLU:HA	1.98	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:I:479:LEU:H	5:I:522:ILE:CG2	2.25	0.46
5:I:525:ASP:HA	5:I:568:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:340:GLN:NE2	1:A:343:GLN:H	2.14	0.46
1:A:371:ILE:O	1:A:375:SER:OG	2.23	0.46
1:A:1095:ASP:OD1	1:A:1109:HIS:ND1	2.47	0.46
1:A:1974:PRO:HD2	1:A:2741:PHE:HE1	1.81	0.46
1:A:3445:ASN:HB2	1:A:3455:SER:OG	2.15	0.46
1:A:3824:GLN:HE21	1:A:3857:VAL:HG13	1.79	0.46
4:B:217:ALA:HA	4:B:220:ASN:HB2	1.98	0.46
5:I:523:VAL:HG21	5:I:568:LEU:N	2.31	0.46
6:N:37:PHE:CG	6:N:97:ALA:HB2	2.49	0.46
5:R:276:CYS:SG	5:R:288:GLU:HB3	2.55	0.46
1:A:707:LYS:HE2	1:A:716:ASN:HB3	1.98	0.46
1:A:776:TYR:HA	1:A:786:PHE:HA	1.98	0.46
1:A:1151:ASP:HB2	1:A:1164:ARG:HG3	1.98	0.46
1:A:1175:GLU:HG2	1:A:1286:LYS:HG3	1.98	0.46
1:A:1501:TYR:HE1	1:A:1518:SER:HB2	1.80	0.46
1:A:1518:SER:OG	1:A:1533:ILE:N	2.38	0.46
1:A:2000:ASN:HA	1:A:2005:ILE:HG13	1.96	0.46
4:B:505:GLU:HA	4:B:508:GLU:HB2	1.97	0.46
5:I:476:PRO:HG2	5:I:479:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:259:ALA:N	1:A:286:LEU:O	2.49	0.46
1:A:528:ILE:HD13	1:A:560:ALA:HB3	1.96	0.46
1:A:710:PHE:CZ	1:A:764:ASP:HB2	2.50	0.46
1:A:1109:HIS:O	1:A:1121:LYS:N	2.38	0.46
1:A:2757:LYS:HD3	1:A:2759:TYR:HB3	1.97	0.46
1:A:3634:LYS:HA	1:A:3647:GLN:HA	1.98	0.46
2:H:29:PHE:CE2	2:H:74:ASN:HA	2.51	0.46
2:H:38:ARG:O	2:H:46:GLU:N	2.48	0.46
6:N:69:THR:O	6:N:81:LEU:HD12	2.14	0.46
6:N:94:TYR:N	6:N:117:THR:O	2.33	0.46
1:A:45:ARG:NH2	1:A:190:PHE:HE2	2.12	0.46
1:A:135:ILE:HG13	1:A:138:GLY:HA2	1.98	0.46
1:A:483:ASP:HA	1:A:486:TYR:HB3	1.97	0.46
1:A:1022:LEU:HA	1:A:1031:ASP:HA	1.97	0.46
1:A:3536:SER:O	1:A:3544:LEU:N	2.49	0.46
1:A:3560:TYR:CE1	5:R:311:LYS:HD3	2.51	0.46
1:A:3590:GLU:O	1:A:3597:SER:N	2.49	0.46
1:A:3920:THR:HG23	1:A:3921:VAL:HG23	1.97	0.46
4:B:401:LYS:O	4:B:404:ASN:HB2	2.15	0.46
5:I:609:PHE:CD2	5:I:649:PRO:HG2	2.51	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
6:N:95:TYR:CD1	6:N:116:GLY:HA2	2.51	0.46
1:A:145:PRO:O	1:A:147:LYS:NZ	2.48	0.46
1:A:670:GLU:OE2	1:A:671:SER:N	2.49	0.46
1:A:3117:ILE:HB	1:A:3171:LEU:HD22	1.97	0.46
1:A:4087:LYS:O	1:A:4091:GLU:N	2.49	0.46
2:H:62:ASP:OD1	2:H:63:THR:N	2.49	0.46
2:H:149:GLY:HA2	2:H:164:TRP:CH2	2.45	0.46
3:L:37:THR:O	3:L:56:TRP:HD1	1.99	0.46
4:B:11:ILE:HG12	4:B:63:PHE:CE1	2.51	0.46
4:B:378:GLN:HE21	4:B:407:GLN:NE2	2.14	0.46
5:R:348:ALA:O	5:R:349:GLN:HG2	2.16	0.46
1:A:90:PHE:O	1:A:91:ILE:HD13	2.16	0.46
1:A:653:ALA:HA	1:A:676:THR:O	2.15	0.46
1:A:1015:SER:OG	1:A:1040:GLU:OE1	2.34	0.46
1:A:1771:ASP:HA	1:A:1780:TYR:O	2.15	0.46
1:A:1917:LEU:HG	1:A:1919:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:2970:VAL:HG12	1:A:2992:VAL:HG13	1.96	0.46
1:A:4013:MET:HG2	1:A:4022:TRP:CD1	2.51	0.46
2:H:4:LEU:HA	2:H:24:ALA:HA	1.97	0.46
2:H:36:TRP:NE1	2:H:81:LEU:HB2	2.31	0.46
4:B:281:PHE:HA	4:B:285:TYR:HD2	1.80	0.46
6:N:38:ARG:HB2	6:N:94:TYR:CE1	2.50	0.46
1:A:1153:SER:HB3	1:A:1160:THR:HG1	1.80	0.46
1:A:1402:TYR:HB3	1:A:1428:HIS:ND1	2.30	0.46
1:A:1440:VAL:HB	1:A:1450:LYS:HE3	1.97	0.46
1:A:1611:PHE:HD1	1:A:1630:ILE:HD11	1.81	0.46
1:A:1889:SER:O	1:A:1916:LYS:HB2	2.16	0.46
1:A:3750:HIS:HB2	1:A:3757:GLN:HB2	1.96	0.46
2:H:207:ASN:HB3	2:H:216:LYS:HZ1	1.80	0.46
4:B:401:LYS:HA	4:B:404:ASN:OD1	2.16	0.46
5:R:296:CYS:HB3	5:R:313:CYS:HB2	1.69	0.46
1:A:56:TYR:CD1	1:A:160:ILE:HG12	2.51	0.46
1:A:437:ARG:HH12	1:A:487:LEU:HD23	1.81	0.46
1:A:536:PRO:HB2	1:A:541:GLN:NE2	2.29	0.46
1:A:2824:LEU:HD22	1:A:2843:MET:HB3	1.98	0.46
1:A:3244:ARG:HE	1:A:3272:TYR:HA	1.80	0.46
1:A:3357:PHE:HB3	8:A:4601:NAG:H82	1.98	0.46
1:A:3710:TYR:HD1	1:A:3712:LYS:HZ1	1.63	0.46
2:H:20:LEU:HD21	2:H:94:TYR:HD2	1.81	0.46
3:L:60:ARG:HH21	3:L:69:THR:HA	1.81	0.46
4:B:22:LEU:O	4:B:26:GLY:N	2.39	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
4:B:45:LEU:HA	4:B:48:LYS:HB2	1.98	0.46
4:B:119:TYR:CE1	4:B:127:PRO:HB3	2.51	0.46
4:B:155:GLU:HA	4:B:346:ARG:HH12	1.81	0.46
6:N:37:PHE:HB3	6:N:45:ARG:HH11	1.80	0.46
1:A:248:THR:O	1:A:257:ALA:N	2.49	0.45
1:A:445:LEU:O	1:A:449:VAL:HG22	2.16	0.45
1:A:906:PHE:O	1:A:937:SER:N	2.29	0.45
1:A:1710:LEU:N	1:A:1729:PHE:O	2.46	0.45
1:A:3543:ASN:HB3	1:A:3570:HIS:HB3	1.98	0.45
5:R:73:PHE:CE2	5:R:100:ASP:HB3	2.52	0.45
5:R:346:LEU:HB2	5:R:354:ASP:C	2.36	0.45
1:A:78:CYS:HB3	1:A:97:CYS:HB2	1.59	0.45
1:A:665:ASN:HD21	1:A:669:LYS:HB2	1.81	0.45
1:A:788:SER:OG	1:A:791:ASP:N	2.38	0.45
1:A:1377:ASN:OD1	1:A:1383:PHE:HA	2.16	0.45
1:A:2887:THR:O	1:A:2907:ARG:HA	2.17	0.45
1:A:3946:LYS:HD3	1:A:3946:LYS:HA	1.70	0.45
1:A:4075:PRO:HG3	1:A:4521:ILE:HG21	1.97	0.45
2:H:19:ARG:HH12	2:H:82:GLN:HB2	1.81	0.45
3:L:30:LEU:HD22	3:L:35:GLN:HB3	1.99	0.45
3:L:92:TYR:N	3:L:107:THR:O	2.49	0.45
3:L:200:GLU:HG2	3:L:200:GLU:O	2.15	0.45
4:B:459:GLU:O	4:B:462:LYS:HG2	2.16	0.45
5:I:405:ASN:OD1	5:I:646:LEU:HA	2.16	0.45
5:R:281:LYS:N	5:R:291:THR:HB	2.31	0.45
1:A:39:CYS:HB3	1:A:87:LEU:HD22	1.98	0.45
1:A:131:LEU:HD23	1:A:133:LEU:HD22	1.97	0.45
1:A:1134:ARG:N	1:A:1153:SER:O	2.40	0.45
1:A:1170:ASP:HB3	1:A:1173:LYS:O	2.16	0.45
1:A:1945:ASP:HA	1:A:1967:LYS:HA	1.98	0.45
1:A:2431:ASP:OD2	1:A:2434:GLN:NE2	2.50	0.45
1:A:3110:ILE:O	1:A:3177:TYR:HB3	2.16	0.45
1:A:4514:ILE:O	1:A:4518:LYS:HB2	2.16	0.45
2:H:51:ILE:HD13	2:H:57:THR:O	2.17	0.45
2:H:70:ILE:HD13	2:H:81:LEU:HD13	1.98	0.45
2:H:73:ASP:OD2	2:H:76:LYS:HE3	2.16	0.45
4:B:9:LEU:HD13	4:B:281:PHE:CD2	2.52	0.45
4:B:116:SER:OG	4:B:246:VAL:HG13	2.17	0.45
4:B:234:TRP:CH2	4:B:322:THR:HG21	2.51	0.45
4:B:373:ASN:OD1	4:B:374:LEU:N	2.50	0.45
6:N:18:LEU:N	6:N:83:MET:O	2.46	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:355:LEU:HA	1:A:358:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:571:GLN:O	1:A:575:ASN:ND2	2.34	0.45
1:A:1559:ALA:HA	1:A:1572:SER:HA	1.98	0.45
1:A:1985:THR:N	1:A:1992:TYR:O	2.48	0.45
1:A:2840:GLY:O	1:A:2855:ASN:N	2.43	0.45
1:A:3571:LEU:O	1:A:3579:THR:N	2.42	0.45
1:A:3805:ASP:OD1	1:A:3806:SER:N	2.46	0.45
1:A:4523:LEU:O	1:A:4527:ASN:ND2	2.50	0.45
4:B:392:VAL:O	4:B:392:VAL:HG12	2.16	0.45
5:I:400:TYR:HB2	5:I:655:PHE:CE2	2.52	0.45
5:I:563:PRO:HA	5:I:579:ASP:HA	1.98	0.45
5:R:210:ILE:HG22	5:R:214:TRP:CD2	2.51	0.45
1:A:56:TYR:O	1:A:78:CYS:N	2.28	0.45
1:A:206:GLU:HG3	1:A:245:CYS:H	1.82	0.45
1:A:430:PHE:HB3	1:A:466:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:523:ILE:H	1:A:523:ILE:HD12	1.81	0.45
1:A:1451:GLY:N	1:A:1471:LEU:O	2.39	0.45
1:A:3234:LYS:HE2	1:A:3234:LYS:HB3	1.77	0.45
1:A:3460:PHE:CZ	1:A:3462:TYR:HB3	2.52	0.45
1:A:3501:LYS:HD3	1:A:3510:SER:HA	1.97	0.45
1:A:4470:SER:O	1:A:4474:GLN:NE2	2.50	0.45
4:B:123:LEU:HB2	4:B:225:ALA:HB2	1.98	0.45
4:B:508:GLU:HG2	4:B:533:PHE:CD2	2.51	0.45
5:I:445:ASP:O	5:I:475:ALA:N	2.50	0.45
1:A:443:TYR:HH	1:A:786:PHE:HD1	1.64	0.45
1:A:496:GLY:H	1:A:533:LYS:HZ1	1.65	0.45
1:A:529:GLN:HA	1:A:532:ARG:HB2	1.97	0.45
1:A:794:LEU:O	1:A:798:LEU:N	2.49	0.45
1:A:1682:MET:N	1:A:1701:GLY:O	2.37	0.45
1:A:1857:ALA:HB3	1:A:1864:PHE:HD2	1.82	0.45
1:A:1987:PHE:HB2	1:A:1992:TYR:CE2	2.51	0.45
1:A:2055:VAL:HB	1:A:2764:ILE:HA	1.99	0.45
1:A:2961:ASN:O	1:A:2972:GLN:NE2	2.50	0.45
1:A:3341:PHE:CZ	1:A:3343:PHE:HB2	2.52	0.45
1:A:4021:LYS:HD3	1:A:4023:ASN:HB2	1.97	0.45
1:A:4031:SER:O	1:A:4031:SER:OG	2.34	0.45
1:A:4548:MET:N	1:A:4548:MET:SD	2.89	0.45
3:L:151:VAL:HG13	3:L:201:VAL:HA	1.99	0.45
4:B:67:ASP:OD1	4:B:67:ASP:N	2.50	0.45
4:B:234:TRP:HB3	4:B:318:ARG:HD3	1.97	0.45
6:N:72:GLN:HB2	6:N:79:VAL:HG12	1.98	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:49:LEU:HA	1:A:85:PRO:HA	1.99	0.45
1:A:342:ILE:HA	1:A:880:SER:OG	2.16	0.45
1:A:508:SER:HA	1:A:511:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:541:GLN:HB3	1:A:573:ASP:OD2	2.16	0.45
1:A:1161:VAL:HA	1:A:1182:THR:HG1	1.82	0.45
1:A:1575:ASN:HA	1:A:1584:SER:HA	1.97	0.45
1:A:2430:PHE:HD2	1:A:2435:PHE:HE2	1.63	0.45
1:A:3106:ASN:HA	1:A:3110:ILE:HA	1.98	0.45
1:A:3127:ASN:N	1:A:3151:SER:OG	2.44	0.45
2:H:86:LEU:HB3	2:H:121:VAL:HG11	1.97	0.45
4:B:455:ASN:O	4:B:459:GLU:N	2.43	0.45
5:I:498:VAL:HG21	5:I:531:MET:HG2	1.98	0.45
6:N:36:TRP:CE2	6:N:81:LEU:HB2	2.52	0.45
1:A:334:LYS:HB3	1:A:344:ARG:HH22	1.82	0.45
1:A:1881:MET:H	1:A:1896:PHE:HD2	1.65	0.45
1:A:3093:PHE:HB3	1:A:3096:TYR:HB2	1.98	0.45
1:A:3729:LYS:HD3	1:A:3731:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:4089:HIS:O	1:A:4094:GLY:N	2.40	0.45
2:H:35:HIS:CE1	3:L:101:TRP:CZ2	3.04	0.45
5:I:519:PRO:HA	5:I:534:THR:O	2.16	0.45
1:A:348:PHE:O	1:A:352:VAL:N	2.47	0.45
1:A:961:GLN:N	1:A:981:TYR:O	2.50	0.45
1:A:1527:LEU:HD13	1:A:1552:SER:H	1.81	0.45
1:A:1938:LEU:HD22	1:A:2428:LYS:HD2	1.98	0.45
1:A:2955:THR:HG21	1:A:2978:SER:HB2	1.99	0.45
1:A:2976:TYR:HA	1:A:2986:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:3168:SER:OG	5:R:165:TRP:NE1	2.49	0.45
1:A:3548:GLU:CD	1:A:3565:HIS:HD1	2.20	0.45
1:A:3558:ARG:HB2	1:A:3591:LEU:C	2.37	0.45
1:A:3750:HIS:HA	1:A:3757:GLN:HA	1.99	0.45
1:A:4017:ASP:N	1:A:4017:ASP:OD1	2.50	0.45
2:H:27:PHE:HE2	2:H:32:PHE:HB2	1.82	0.45
2:H:35:HIS:CD2	2:H:99:ARG:HB2	2.52	0.45
5:I:478:GLY:HA2	5:I:522:ILE:HG22	1.99	0.45
5:I:483:TRP:CZ2	5:I:659:THR:HG22	2.52	0.45
5:I:614:PHE:HB2	5:I:617:LYS:O	2.17	0.45
1:A:869:MET:CG	1:A:917:LEU:HB3	2.47	0.45
1:A:1386:ARG:NE	1:A:1410:THR:O	2.47	0.45
1:A:1501:TYR:HE2	1:A:1503:LEU:HB2	1.82	0.45
1:A:1843:SER:O	1:A:1850:SER:N	2.50	0.45
1:A:1892:PHE:HE1	1:A:1911:THR:HG23	1.82	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1897:ARG:NH1	1:A:2730:ASP:O	2.50	0.45
1:A:3813:ILE:HG13	1:A:3815:VAL:HG13	1.99	0.45
4:B:152:ASN:HD21	4:B:154:GLN:NE2	2.15	0.45
4:B:351:ASN:OD1	4:B:356:ARG:NE	2.49	0.45
1:A:63:GLY:O	1:A:279:VAL:N	2.31	0.44
1:A:313:THR:O	1:A:845:GLN:HG2	2.17	0.44
1:A:1155:THR:HA	1:A:1160:THR:HB	1.99	0.44
1:A:1628:ALA:HB3	1:A:1643:ALA:HB3	1.99	0.44
1:A:3019:GLY:O	1:A:3036:SER:OG	2.32	0.44
1:A:3365:HIS:CD2	5:R:198:SER:HG	2.34	0.44
1:A:4537:GLU:HA	1:A:4540:LYS:HE2	1.99	0.44
2:H:67:ARG:NH1	2:H:84:ASN:O	2.50	0.44
2:H:149:GLY:HA3	2:H:191:VAL:HA	2.00	0.44
1:A:303:THR:OG1	1:A:304:LYS:NZ	2.49	0.44
1:A:2406:GLU:OE1	1:A:2406:GLU:N	2.43	0.44
1:A:2915:LYS:HB3	1:A:2918:HIS:HB3	2.00	0.44
1:A:3018:THR:HA	1:A:3038:PHE:HA	1.99	0.44
1:A:3257:ASN:O	1:A:3286:LEU:N	2.41	0.44
1:A:3665:LEU:HD23	1:A:3702:LEU:HD12	1.98	0.44
2:H:34:MET:CE	2:H:72:ARG:HD2	2.48	0.44
4:B:61:ILE:HA	4:B:268:ILE:HA	1.98	0.44
4:B:142:LYS:HD2	4:B:147:SER:HA	1.99	0.44
4:B:152:ASN:OD1	4:B:153:LEU:N	2.50	0.44
4:B:287:LEU:HD23	4:B:292:LEU:HD11	2.00	0.44
4:B:395:GLU:O	4:B:399:GLU:N	2.33	0.44
5:I:447:SER:OG	5:I:448:GLN:NE2	2.49	0.44
6:N:5:GLN:O	6:N:22:CYS:HA	2.18	0.44
1:A:1037:THR:HG23	1:A:1046:GLU:HA	1.99	0.44
1:A:1715:GLN:HA	1:A:1724:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:1722:ASP:O	1:A:1744:GLY:HA2	2.17	0.44
1:A:1946:TYR:HD2	1:A:1966:HIS:ND1	2.15	0.44
1:A:2808:PHE:CZ	1:A:2810:ALA:HB2	2.53	0.44
1:A:4019:PHE:CE2	1:A:4021:LYS:HB2	2.52	0.44
4:B:483:THR:OG1	4:B:484:TYR:N	2.50	0.44
5:I:520:ARG:HH11	5:I:520:ARG:C	2.20	0.44
5:R:250:HIS:CD2	5:R:253:ARG:H	2.35	0.44
1:A:52:TYR:CE2	1:A:84:VAL:HG12	2.53	0.44
1:A:521:LEU:O	1:A:525:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:686:ASP:N	1:A:686:ASP:OD1	2.48	0.44
1:A:1016:VAL:HA	1:A:1037:THR:HA	1.99	0.44
1:A:2057:PHE:CE2	1:A:2761:ILE:HG23	2.52	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3527:ARG:NH1	1:A:3553:GLU:OE2	2.50	0.44
2:H:64:VAL:HB	2:H:67:ARG:HB2	1.99	0.44
3:L:54:ILE:HD13	3:L:70:GLY:H	1.82	0.44
3:L:124:PRO:HA	3:L:137:VAL:HG23	1.99	0.44
5:I:628:ILE:HG21	5:I:642:LEU:HD23	1.99	0.44
5:R:91:GLY:N	5:R:101:GLU:OE1	2.50	0.44
1:A:392:THR:HB	1:A:428:GLU:HG2	2.00	0.44
1:A:972:GLY:HA2	1:A:1010:GLU:HG2	1.99	0.44
1:A:1065:GLN:NE2	1:A:1071:VAL:O	2.32	0.44
1:A:1163:LYS:HA	1:A:1179:ASN:HB3	1.99	0.44
1:A:1369:TRP:NE1	1:A:1391:MET:HB2	2.32	0.44
1:A:2729:ASN:O	1:A:2732:GLN:NE2	2.50	0.44
1:A:2795:ALA:N	1:A:2808:PHE:O	2.50	0.44
1:A:3814:THR:O	1:A:3816:PRO:HD3	2.18	0.44
2:H:176:PHE:O	2:H:188:LEU:HD22	2.18	0.44
3:L:128:GLU:HG2	4:B:519:GLY:HA3	1.99	0.44
4:B:29:PHE:HE1	4:B:277:LEU:HD11	1.83	0.44
5:R:202:PHE:H	5:R:211:HIS:HA	1.82	0.44
1:A:51:LYS:O	1:A:291:THR:HA	2.18	0.44
1:A:581:LEU:HD22	1:A:593:VAL:HG12	1.98	0.44
1:A:658:ASN:CB	1:A:672:MET:HB2	2.46	0.44
1:A:1397:VAL:HG12	1:A:1399:LEU:H	1.83	0.44
1:A:2092:LEU:HD22	1:A:2401:VAL:HG22	2.00	0.44
1:A:2730:ASP:OD1	1:A:2730:ASP:N	2.49	0.44
1:A:3440:PHE:CD1	1:A:3460:PHE:HB2	2.51	0.44
1:A:3444:LEU:HA	1:A:3456:SER:HA	1.99	0.44
1:A:3447:ASN:ND2	1:A:3451:LYS:O	2.41	0.44
1:A:3666:GLU:HA	1:A:3700:GLN:O	2.17	0.44
1:A:3672:LEU:HD23	1:A:3685:TRP:HE3	1.82	0.44
4:B:47:GLU:HG3	4:B:68:ARG:HH21	1.82	0.44
4:B:108:TYR:O	4:B:266:ALA:N	2.51	0.44
4:B:487:VAL:HA	4:B:496:GLU:HA	1.99	0.44
5:I:432:LEU:C	5:I:522:ILE:HD11	2.37	0.44
6:N:17:SER:HA	6:N:84:ASN:HA	2.00	0.44
1:A:93:LYS:HE2	1:A:93:LYS:HB2	1.86	0.44
1:A:352:VAL:HA	1:A:355:LEU:HG	2.00	0.44
1:A:359:SER:O	1:A:363:VAL:HG22	2.18	0.44
1:A:608:ILE:O	1:A:612:LYS:HG3	2.18	0.44
1:A:877:PRO:O	1:A:909:SER:OG	2.35	0.44
1:A:984:ALA:HA	1:A:990:ALA:HB3	2.00	0.44
1:A:1011:ILE:HD11	1:A:1043:LYS:HE3	2.00	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1425:SER:OG	1:A:1436:LYS:HA	2.17	0.44
1:A:1592:SER:HB2	1:A:1595:ASN:O	2.18	0.44
1:A:2019:LEU:O	1:A:2019:LEU:HD23	2.18	0.44
1:A:2943:GLU:OE1	1:A:2943:GLU:N	2.50	0.44
1:A:3086:SER:OG	1:A:3088:GLN:OE1	2.20	0.44
1:A:3344:LYS:NZ	5:R:164:LEU:HG	2.32	0.44
1:A:3518:ASN:O	1:A:3529:SER:N	2.50	0.44
1:A:3563:TRP:CZ2	1:A:3565:HIS:HB2	2.52	0.44
2:H:82:GLN:HG2	4:B:444:GLN:NE2	2.29	0.44
3:L:81:ILE:HG22	3:L:83:SER:O	2.18	0.44
5:I:654:LEU:HB3	5:I:659:THR:OG1	2.18	0.44
5:R:227:ASP:OD1	5:R:228:GLU:N	2.49	0.44
5:R:285:HIS:O	5:R:286:SER:OG	2.32	0.44
5:R:340:CYS:SG	5:R:345:GLN:HA	2.58	0.44
1:A:134:ALA:HB2	1:A:299:PHE:CZ	2.53	0.44
1:A:220:THR:CG2	1:A:221:GLY:H	2.25	0.44
1:A:778:ARG:HD2	1:A:783:GLU:HB2	1.99	0.44
1:A:1558:THR:N	1:A:1573:ASP:O	2.44	0.44
1:A:1928:TYR:O	1:A:1947:LYS:N	2.47	0.44
1:A:2021:ASP:OD1	1:A:2037:ILE:N	2.49	0.44
1:A:2811:ASN:OD1	1:A:2813:GLN:NE2	2.34	0.44
1:A:3440:PHE:HB2	1:A:3460:PHE:CD1	2.53	0.44
1:A:3772:LYS:NZ	1:A:3798:THR:O	2.31	0.44
1:A:4113:GLU:O	1:A:4117:GLN:NE2	2.51	0.44
2:H:79:LEU:HD13	2:H:96:CYS:HB2	1.99	0.44
5:I:565:GLY:O	5:I:577:TRP:HB2	2.18	0.44
5:R:332:LEU:N	5:R:335:GLY:O	2.51	0.44
1:A:89:SER:HB2	1:A:299:PHE:CZ	2.53	0.44
1:A:437:ARG:NH1	1:A:487:LEU:HD23	2.33	0.44
1:A:1280:LYS:O	1:A:1363:TYR:HB3	2.18	0.44
1:A:1356:LEU:N	1:A:1375:GLY:O	2.42	0.44
1:A:1362:VAL:HG23	1:A:1367:TYR:HE2	1.82	0.44
1:A:1481:VAL:HG22	1:A:1506:GLN:HA	2.00	0.44
1:A:1550:LEU:HG	1:A:1551:GLN:HG2	2.00	0.44
1:A:1672:ASN:HD21	1:A:1683:LYS:HE2	1.82	0.44
1:A:1864:PHE:HB2	1:A:1885:TYR:HD1	1.82	0.44
1:A:2909:GLU:HG2	1:A:2924:SER:HB3	1.99	0.44
1:A:3009:LEU:HD13	1:A:3013:GLY:HA3	1.99	0.44
1:A:3431:ALA:O	1:A:3438:MET:HE3	2.18	0.44
1:A:3554:ALA:HA	1:A:3559:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:3560:TYR:CE2	5:R:310:ILE:HG13	2.53	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:H:105:ASP:OD1	2:H:106:TYR:N	2.51	0.44
2:H:107:GLY:HA2	3:L:38:TYR:CE2	2.53	0.44
4:B:246:VAL:HG12	4:B:321:ALA:HB3	2.00	0.44
4:B:398:ALA:O	4:B:402:LYS:N	2.46	0.44
4:B:405:GLU:CD	4:B:405:GLU:H	2.22	0.44
4:B:443:ILE:HD12	4:B:443:ILE:HA	1.87	0.44
4:B:486:LEU:HB2	4:B:533:PHE:HB2	2.00	0.44
5:I:546:GLY:N	5:I:551:ASP:O	2.42	0.44
1:A:427:ARG:HD2	1:A:428:GLU:N	2.33	0.43
1:A:662:ASP:OD1	1:A:663:PRO:HD2	2.17	0.43
1:A:698:GLU:HA	1:A:701:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:788:SER:H	1:A:791:ASP:HB2	1.82	0.43
1:A:2451:ASN:OD1	1:A:2452:GLY:N	2.51	0.43
1:A:2903:GLN:OE1	1:A:2903:GLN:N	2.51	0.43
1:A:3083:GLN:N	1:A:3106:ASN:OD1	2.50	0.43
2:H:13:GLN:HE21	2:H:16:LYS:HB2	1.83	0.43
4:B:13:ILE:HG12	4:B:14:ASN:H	1.83	0.43
5:I:479:LEU:HB3	5:I:489:TYR:HB3	1.99	0.43
5:R:325:CYS:HA	5:R:350:ARG:HD3	2.00	0.43
1:A:600:ILE:HG22	1:A:601:LEU:HD22	1.99	0.43
1:A:840:THR:HG23	1:A:842:ALA:N	2.33	0.43
1:A:840:THR:OG1	1:A:841:GLY:N	2.51	0.43
1:A:1017:SER:OG	1:A:1036:VAL:N	2.48	0.43
1:A:1455:PHE:O	1:A:1466:SER:HA	2.18	0.43
1:A:1953:HIS:HD2	1:A:1957:ARG:HE	1.65	0.43
1:A:2983:PHE:HA	1:A:3009:LEU:HA	2.00	0.43
1:A:3435:ILE:HG22	1:A:3464:PHE:HE1	1.83	0.43
1:A:3710:TYR:HE1	1:A:3712:LYS:HB3	1.82	0.43
1:A:3934:HIS:CD2	1:A:3943:SER:HA	2.53	0.43
5:I:431:ALA:HA	5:I:651:ASP:OD1	2.17	0.43
5:I:476:PRO:HA	5:I:493:SER:HB2	1.99	0.43
6:N:35:GLY:C	6:N:97:ALA:H	2.16	0.43
5:R:84:PRO:HG2	5:R:87:TRP:CD1	2.53	0.43
1:A:153:ILE:HG12	1:A:157:LYS:HE2	2.00	0.43
1:A:371:ILE:HG21	1:A:397:TRP:HD1	1.82	0.43
1:A:484:TYR:O	1:A:488:ILE:HG12	2.19	0.43
1:A:592:PHE:HB3	1:A:596:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:788:SER:O	1:A:792:LEU:N	2.36	0.43
1:A:1362:VAL:HG23	1:A:1369:TRP:HB3	2.00	0.43
1:A:1398:ASP:OD1	1:A:1399:LEU:N	2.52	0.43
1:A:1648:GLY:H	1:A:1652:ILE:HD13	1.82	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1993:SER:OG	1:A:2012:ARG:O	2.33	0.43
1:A:2773:ALA:HA	1:A:2794:THR:O	2.19	0.43
1:A:3117:ILE:H	1:A:3171:LEU:HB2	1.83	0.43
1:A:3152:LEU:HD21	1:A:3155:LYS:HB3	2.00	0.43
1:A:3392:GLY:HA3	1:A:3416:LEU:HB2	2.00	0.43
1:A:4510:TYR:CZ	1:A:4514:ILE:HD11	2.53	0.43
4:B:172:LYS:HB3	4:B:174:GLU:OE1	2.18	0.43
5:I:477:ASP:OD1	5:I:478:GLY:N	2.44	0.43
5:I:520:ARG:HE	5:I:609:PHE:CB	2.30	0.43
5:I:588:ILE:HG23	5:I:594:ASN:H	1.82	0.43
5:R:126:PHE:HB3	5:R:139:ASP:OD2	2.19	0.43
5:R:309:PRO:O	5:R:334:ILE:HD11	2.17	0.43
1:A:270:PHE:HB3	1:A:994:PRO:HB2	1.99	0.43
1:A:333:LYS:HE3	1:A:373:VAL:HG13	2.01	0.43
1:A:1435:ILE:HA	1:A:1454:ILE:O	2.17	0.43
1:A:1572:SER:N	1:A:1588:ASP:OD1	2.52	0.43
1:A:3527:ARG:HH22	5:R:310:ILE:HG12	1.82	0.43
1:A:3644:PHE:HE2	1:A:3646:SER:HB3	1.84	0.43
1:A:3933:THR:OG1	1:A:3944:LYS:HB2	2.18	0.43
1:A:4086:ASN:O	1:A:4090:TRP:HD1	2.01	0.43
2:H:71:SER:OG	2:H:72:ARG:N	2.52	0.43
2:H:216:LYS:NZ	2:H:217:VAL:O	2.51	0.43
4:B:61:ILE:HG12	4:B:63:PHE:CE1	2.53	0.43
4:B:282:LEU:HA	4:B:286:LEU:HB2	2.01	0.43
4:B:328:LYS:HA	4:B:328:LYS:HD2	1.79	0.43
5:R:214:TRP:O	5:R:227:ASP:HB2	2.18	0.43
5:R:346:LEU:HD13	5:R:353:GLU:HG2	2.00	0.43
1:A:158:ARG:HD3	1:A:308:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:293:LYS:HD2	5:I:623:ILE:HG21	1.99	0.43
1:A:295:ASN:OD1	5:I:607:HIS:ND1	2.51	0.43
1:A:427:ARG:NH1	1:A:428:GLU:HB3	2.33	0.43
1:A:436:GLN:HE21	1:A:441:THR:CG2	2.31	0.43
1:A:473:GLN:HB3	1:A:488:ILE:HD12	2.00	0.43
1:A:924:PHE:O	1:A:1015:SER:HA	2.18	0.43
1:A:935:LEU:HG	1:A:1004:GLU:HA	2.00	0.43
1:A:964:SER:HA	1:A:978:SER:HA	2.00	0.43
1:A:1281:SER:HB3	1:A:1361:ASN:HB2	2.00	0.43
1:A:1386:ARG:HB3	1:A:1388:ARG:NH2	2.33	0.43
1:A:3543:ASN:HD22	1:A:3570:HIS:HB3	1.83	0.43
1:A:3888:GLU:HA	1:A:3897:THR:HA	1.99	0.43
1:A:3891:SER:HB2	1:A:3893:VAL:HG12	1.99	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3922:GLN:HB2	1:A:3952:ARG:HG3	2.01	0.43
1:A:4073:ASN:HA	1:A:4076:LYS:HB2	2.01	0.43
2:H:58:LYS:HG2	4:B:452:GLN:HG2	1.99	0.43
4:B:131:TRP:CD2	4:B:250:PRO:HG2	2.54	0.43
5:I:423:ILE:HG13	5:I:423:ILE:O	2.18	0.43
1:A:47:LYS:HZ3	1:A:254:LYS:HD3	1.83	0.43
1:A:88:CYS:SG	1:A:136:PRO:HA	2.58	0.43
1:A:103:TYR:CD1	1:A:114:LYS:HB3	2.54	0.43
1:A:141:VAL:HG11	1:A:308:LEU:HB2	2.00	0.43
1:A:175:GLN:N	1:A:190:PHE:O	2.48	0.43
1:A:189:HIS:HD2	1:A:206:GLU:O	2.02	0.43
1:A:579:GLN:NE2	1:A:621:GLU:OE2	2.52	0.43
1:A:619:LEU:HD22	1:A:624:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:967:LYS:N	1:A:975:TYR:O	2.52	0.43
1:A:1021:GLU:OE1	1:A:1032:THR:OG1	2.30	0.43
1:A:1729:PHE:CD1	1:A:1738:LEU:HD12	2.53	0.43
2:H:73:ASP:HB3	2:H:76:LYS:HG2	2.00	0.43
3:L:92:TYR:HB2	3:L:107:THR:H	1.84	0.43
4:B:341:PHE:CD1	4:B:370:ILE:HG12	2.53	0.43
4:B:421:GLN:OE1	4:B:421:GLN:N	2.41	0.43
5:I:617:LYS:HA	5:I:632:ASN:HA	1.99	0.43
5:R:216:CYS:N	5:R:227:ASP:O	2.33	0.43
1:A:934:LYS:HA	1:A:1004:GLU:HB3	2.00	0.43
1:A:1578:TYR:CG	1:A:1579:LYS:N	2.87	0.43
1:A:1595:ASN:HA	1:A:1619:LEU:O	2.18	0.43
1:A:1672:ASN:ND2	1:A:1683:LYS:HE2	2.34	0.43
1:A:1914:ASN:HB2	1:A:1916:LYS:HZ1	1.83	0.43
1:A:3082:ALA:HA	1:A:3106:ASN:O	2.19	0.43
1:A:3426:ALA:HA	1:A:3443:GLU:HA	2.01	0.43
1:A:4057:ASN:HA	1:A:4558:GLU:HA	2.01	0.43
4:B:173:TYR:HB2	4:B:178:TYR:CZ	2.53	0.43
4:B:488:ILE:HG12	4:B:511:PHE:CZ	2.53	0.43
5:I:497:THR:HB	5:I:513:ARG:HD2	2.00	0.43
5:R:290:ILE:HG21	5:R:302:CYS:HA	2.01	0.43
1:A:51:LYS:HZ1	1:A:81:GLU:CB	2.25	0.43
1:A:414:LEU:HD13	1:A:417:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:779:ILE:HD11	1:A:784:LEU:HG	2.00	0.43
1:A:1652:ILE:HB	1:A:1675:LEU:HB2	2.01	0.43
1:A:1940:PHE:O	1:A:1971:LEU:HA	2.18	0.43
1:A:1978:THR:HA	1:A:1998:ALA:O	2.18	0.43
1:A:3019:GLY:N	1:A:3037:LEU:O	2.51	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3887:PHE:HB3	1:A:3898:TRP:HB2	2.01	0.43
1:A:4087:LYS:HA	1:A:4090:TRP:HB2	2.00	0.43
1:A:4495:PHE:O	1:A:4498:LYS:HG2	2.19	0.43
2:H:103:ASP:HB2	6:N:124:LEU:HD21	2.01	0.43
4:B:258:LYS:HD2	4:B:328:LYS:O	2.18	0.43
4:B:351:ASN:HA	4:B:356:ARG:HE	1.84	0.43
4:B:425:PHE:O	4:B:428:ILE:HG22	2.18	0.43
5:I:612:ALA:HB2	5:I:652:MET:CB	2.49	0.43
5:R:167:CYS:N	5:R:178:ASP:HB2	2.34	0.43
1:A:457:PRO:O	1:A:501:GLN:NE2	2.51	0.43
1:A:581:LEU:HD21	1:A:594:ALA:HA	2.01	0.43
1:A:1054:ASN:ND2	1:A:1057:SER:OG	2.36	0.43
1:A:1457:ALA:HB3	1:A:1465:MET:SD	2.59	0.43
1:A:1521:ARG:NH1	1:A:1530:THR:O	2.52	0.43
1:A:1766:PHE:CZ	1:A:1768:SER:HB2	2.54	0.43
1:A:1845:ALA:O	1:A:1848:SER:OG	2.23	0.43
1:A:2065:ASP:O	1:A:2753:PRO:HA	2.18	0.43
1:A:2089:ILE:HG12	1:A:2405:ASN:ND2	2.33	0.43
1:A:2870:SER:HB3	1:A:2888:LYS:HB3	2.01	0.43
1:A:3344:LYS:HA	1:A:3344:LYS:HD2	1.77	0.43
1:A:4025:TYR:HA	1:A:4037:THR:HA	1.99	0.43
2:H:3:GLN:HG3	2:H:5:VAL:HG13	2.01	0.43
3:L:44:GLN:O	3:L:91:VAL:HG12	2.18	0.43
4:B:285:TYR:O	4:B:288:THR:HG22	2.18	0.43
4:B:464:ASN:HA	4:B:467:GLN:OE1	2.19	0.43
6:N:18:LEU:O	6:N:82:GLN:NE2	2.51	0.43
5:R:245:ASP:OD2	5:R:263:ASP:N	2.51	0.43
1:A:178:PHE:HB3	8:A:4602:NAG:HN2	1.83	0.43
1:A:233:ARG:NH1	1:A:4049:ASP:O	2.40	0.43
1:A:325:VAL:O	1:A:328:THR:OG1	2.33	0.43
1:A:387:GLN:HB3	1:A:389:GLN:CD	2.39	0.43
1:A:790:HIS:O	1:A:793:GLN:HG3	2.18	0.43
1:A:1158:GLY:O	1:A:1183:ASN:ND2	2.51	0.43
1:A:1476:LYS:HB2	1:A:1481:VAL:HB	2.01	0.43
1:A:1484:VAL:HB	1:A:1503:LEU:HD23	2.01	0.43
1:A:1914:ASN:HA	1:A:1926:GLN:HA	2.01	0.43
1:A:1964:LEU:HD23	1:A:1987:PHE:HZ	1.83	0.43
1:A:3588:THR:OG1	1:A:3599:LEU:O	2.23	0.43
1:A:3690:LEU:HD22	1:A:3893:VAL:HG23	2.01	0.43
4:B:119:TYR:CE1	4:B:245:GLY:HA3	2.54	0.43
4:B:434:LEU:HB2	4:B:438:GLN:HE21	1.83	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
5:I:428:ASN:HB2	5:I:447:SER:HB3	2.01	0.43
5:I:429:VAL:HG13	5:I:650:GLU:OE2	2.19	0.43
5:R:320:ASP:OD1	5:R:320:ASP:N	2.51	0.43
1:A:56:TYR:HD1	1:A:286:LEU:HD21	1.83	0.42
1:A:430:PHE:CE1	1:A:448:ALA:HB3	2.53	0.42
1:A:550:ASP:OD2	1:A:553:SER:OG	2.31	0.42
1:A:559:LEU:HD11	1:A:588:GLN:HB3	2.01	0.42
1:A:665:ASN:HA	1:A:702:GLU:OE2	2.19	0.42
1:A:1093:THR:HG22	1:A:1112:CYS:H	1.82	0.42
1:A:1182:THR:HG1	1:A:1183:ASN:H	1.68	0.42
1:A:1581:PHE:CZ	1:A:1604:ALA:HB1	2.54	0.42
1:A:1852:LYS:HE3	1:A:1869:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:1865:SER:O	1:A:1884:ASN:N	2.46	0.42
1:A:3160:GLU:OE1	1:A:3160:GLU:N	2.40	0.42
1:A:3941:LEU:HB3	1:A:3964:TYR:HD2	1.83	0.42
1:A:3948:THR:HA	1:A:3957:GLU:HG2	2.00	0.42
2:H:126:THR:HA	2:H:156:PHE:CE2	2.54	0.42
3:L:11:LEU:HG	3:L:13:VAL:HG23	2.00	0.42
4:B:371:MET:HB2	4:B:404:ASN:HD21	1.84	0.42
4:B:440:ASN:O	4:B:444:GLN:HG3	2.18	0.42
5:R:247:ASN:HB3	5:R:261:CYS:SG	2.59	0.42
1:A:208:ASP:HB3	1:A:211:GLN:HE21	1.84	0.42
1:A:459:GLY:HA3	1:A:502:LEU:HD21	2.00	0.42
1:A:717:LYS:HD2	1:A:756:LEU:HD12	2.00	0.42
1:A:1470:HIS:HD2	1:A:1485:LYS:NZ	2.17	0.42
1:A:1736:LEU:HG	1:A:1759:ILE:HG12	2.00	0.42
1:A:1744:GLY:O	1:A:1751:PHE:N	2.47	0.42
1:A:1777:ASP:O	1:A:1804:ASN:N	2.51	0.42
1:A:3102:PHE:HB3	1:A:3115:VAL:HG13	2.00	0.42
1:A:3504:VAL:HG22	1:A:3509:TYR:HB2	2.00	0.42
1:A:4108:LEU:HA	1:A:4111:ASN:HB2	2.02	0.42
2:H:22:CYS:O	2:H:79:LEU:HB3	2.20	0.42
3:L:163:ASN:HA	3:L:185:THR:HB	2.01	0.42
3:L:199:CYS:N	3:L:211:THR:OG1	2.52	0.42
5:R:281:LYS:HB2	5:R:289:CYS:HA	2.00	0.42
1:A:118:ASN:OD1	1:A:894:PHE:HB3	2.19	0.42
1:A:263:GLU:HG2	1:A:282:VAL:HG12	2.01	0.42
1:A:481:ASP:HB3	1:A:484:TYR:HB3	2.00	0.42
1:A:533:LYS:HE3	1:A:533:LYS:HB3	1.82	0.42
1:A:1434:ASN:N	1:A:1456:ASP:O	2.52	0.42
1:A:1449:SER:N	1:A:1473:SER:HB2	2.34	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1689:ARG:O	1:A:1694:ASN:ND2	2.50	0.42
1:A:3415:SER:H	1:A:3421:MET:HE1	1.84	0.42
1:A:3634:LYS:HE2	1:A:3645:GLN:HB2	2.01	0.42
1:A:3677:LEU:O	1:A:3681:ASP:HA	2.19	0.42
1:A:4096:THR:O	1:A:4100:VAL:HG23	2.19	0.42
3:L:54:ILE:HG13	3:L:59:THR:C	2.39	0.42
5:R:302:CYS:HB3	5:R:304:ASP:O	2.18	0.42
1:A:54:TYR:HA	1:A:287:LYS:O	2.19	0.42
1:A:64:VAL:HB	1:A:68:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:79:LYS:O	1:A:94:THR:OG1	2.34	0.42
1:A:371:ILE:HD13	1:A:400:ARG:HH11	1.85	0.42
1:A:1632:GLY:HA3	1:A:1640:ALA:HB2	2.00	0.42
1:A:1661:LYS:HA	1:A:1665:LEU:O	2.19	0.42
1:A:1968:VAL:HG21	1:A:1981:TRP:CE3	2.54	0.42
1:A:2881:LEU:HD12	1:A:2914:LEU:HD13	2.01	0.42
1:A:3105:GLY:O	1:A:3112:GLU:N	2.52	0.42
1:A:3276:LYS:HZ2	1:A:3300:PRO:HA	1.83	0.42
1:A:3368:SER:O	1:A:3380:LYS:NZ	2.38	0.42
1:A:3517:ALA:HB2	1:A:3530:VAL:HG23	2.01	0.42
1:A:3553:GLU:HG2	1:A:3560:TYR:HB3	2.01	0.42
1:A:3708:PHE:CZ	1:A:3885:ALA:HB2	2.54	0.42
5:I:617:LYS:N	5:I:633:ARG:H	2.18	0.42
5:R:249:ILE:HB	5:R:253:ARG:HB3	2.00	0.42
1:A:47:LYS:NZ	1:A:254:LYS:HB2	2.34	0.42
1:A:155:ASN:O	1:A:159:GLY:N	2.51	0.42
1:A:188:THR:HG22	1:A:207:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:544:LEU:HD22	1:A:565:LEU:HB2	2.02	0.42
1:A:2811:ASN:N	1:A:2827:SER:O	2.52	0.42
1:A:2928:SER:HA	1:A:2941:THR:HA	2.01	0.42
1:A:3559:ILE:H	1:A:3591:LEU:HD23	1.84	0.42
1:A:3745:VAL:HG13	1:A:3762:LYS:HA	2.01	0.42
1:A:3944:LYS:NZ	1:A:3962:GLY:O	2.52	0.42
1:A:4478:LYS:HB3	1:A:4478:LYS:HE3	1.79	0.42
3:L:41:TRP:HA	3:L:94:CYS:HA	2.01	0.42
4:B:376:GLU:O	4:B:380:ASN:N	2.34	0.42
5:I:402:PHE:O	5:I:432:LEU:HD11	2.19	0.42
5:R:249:ILE:HA	5:R:253:ARG:CZ	2.49	0.42
5:R:282:PHE:HB3	5:R:290:ILE:O	2.20	0.42
5:R:346:LEU:HD23	5:R:347:VAL:N	2.34	0.42
1:A:132:LYS:HB3	1:A:144:TYR:O	2.20	0.42
1:A:238:LEU:HB2	1:A:269:PRO:CD	2.49	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:612:LYS:HB3	1:A:616:LYS:HD3	2.00	0.42
1:A:879:VAL:HG12	1:A:907:HIS:ND1	2.34	0.42
1:A:1167:TRP:CE2	1:A:1169:TYR:HB2	2.55	0.42
1:A:1173:LYS:HB3	1:A:1287:TYR:O	2.19	0.42
1:A:1760:ALA:HB3	1:A:1763:SER:OG	2.19	0.42
1:A:4082:TYR:OH	1:A:4096:THR:OG1	2.37	0.42
2:H:19:ARG:HD2	2:H:80:TYR:HD1	1.85	0.42
4:B:368:ILE:HG23	4:B:369:LEU:HD22	2.02	0.42
5:I:492:ASP:OD2	5:I:513:ARG:NH1	2.53	0.42
5:R:316:ASN:HA	5:R:331:ASP:HB3	2.01	0.42
1:A:539:LYS:HA	1:A:539:LYS:HD2	1.86	0.42
1:A:649:ASP:OD1	1:A:649:ASP:N	2.52	0.42
1:A:686:ASP:OD1	1:A:781:GLY:N	2.53	0.42
1:A:845:GLN:OE1	1:A:845:GLN:N	2.52	0.42
1:A:2889:TYR:OH	1:A:2891:HIS:ND1	2.41	0.42
4:B:216:GLU:O	4:B:220:ASN:N	2.46	0.42
5:I:403:PHE:N	5:I:410:ARG:O	2.49	0.42
1:A:434:ARG:NH2	1:A:466:ILE:HG23	2.34	0.42
1:A:1288:THR:HB	1:A:1355:VAL:N	2.35	0.42
1:A:2059:LYS:HB3	1:A:2759:TYR:CZ	2.54	0.42
1:A:2100:LYS:HD3	1:A:2100:LYS:HA	1.86	0.42
1:A:3527:ARG:NH1	5:R:309:PRO:HA	2.35	0.42
1:A:3644:PHE:CE2	1:A:3646:SER:HB3	2.54	0.42
1:A:3831:VAL:HG23	1:A:3840:LEU:HD11	2.02	0.42
2:H:6:GLU:O	2:H:115:GLN:NE2	2.53	0.42
2:H:17:SER:HB2	2:H:82:GLN:NE2	2.34	0.42
2:H:73:ASP:OD1	2:H:75:PRO:HD2	2.19	0.42
3:L:13:VAL:HG22	3:L:19:VAL:HG11	2.00	0.42
4:B:29:PHE:CG	4:B:281:PHE:HD1	2.37	0.42
4:B:399:GLU:HA	4:B:402:LYS:HD3	2.00	0.42
1:A:55:ASN:OD1	1:A:287:LYS:N	2.53	0.42
1:A:60:SER:HB2	1:A:889:ILE:HD12	2.02	0.42
1:A:79:LYS:HG3	1:A:95:SER:O	2.20	0.42
1:A:121:GLU:O	1:A:125:ALA:N	2.51	0.42
1:A:1389:TYR:CE2	1:A:1406:GLY:HA3	2.55	0.42
1:A:1488:GLY:C	1:A:1499:GLY:H	2.23	0.42
1:A:1605:ASP:OD1	1:A:1609:LEU:N	2.53	0.42
1:A:1616:SER:O	1:A:1616:SER:OG	2.37	0.42
1:A:2726:LEU:HD12	1:A:2726:LEU:HA	1.86	0.42
1:A:2937:SER:O	1:A:2937:SER:OG	2.33	0.42
1:A:2990:SER:N	1:A:3002:LEU:O	2.44	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3557:GLN:HB3	1:A:3593:PRO:HD3	2.01	0.42
2:H:67:ARG:HA	4:B:462:LYS:HZ1	1.83	0.42
2:H:69:THR:O	2:H:81:LEU:HD12	2.20	0.42
3:L:89:LEU:HG	3:L:109:LEU:O	2.19	0.42
4:B:7:GLY:H	4:B:274:ASN:HD21	1.66	0.42
4:B:434:LEU:HD12	4:B:438:GLN:HG3	2.00	0.42
5:I:483:TRP:CH2	5:I:659:THR:HG22	2.54	0.42
1:A:340:GLN:HG2	1:A:342:ILE:HD12	2.01	0.42
1:A:525:LYS:HZ1	1:A:557:LYS:H	1.67	0.42
1:A:562:TYR:CE2	1:A:593:VAL:HG13	2.55	0.42
1:A:1288:THR:HB	1:A:1354:GLY:HA3	2.02	0.42
1:A:1546:SER:HB3	1:A:1559:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:1933:LEU:HD11	1:A:1935:ALA:HB2	2.01	0.42
1:A:2871:ASN:OD1	1:A:2872:GLY:N	2.53	0.42
1:A:2990:SER:OG	1:A:2991:GLN:N	2.53	0.42
1:A:3052:ASN:N	1:A:3073:ASN:OD1	2.47	0.42
1:A:3940:THR:HB	1:A:3963:LYS:NZ	2.35	0.42
4:B:92:TYR:H	4:B:305:ALA:HB1	1.85	0.42
5:R:157:SER:OG	5:R:175:ASP:HB3	2.20	0.42
1:A:101:GLU:HB2	1:A:116:THR:HG21	2.01	0.41
1:A:203:ILE:N	1:A:247:TYR:O	2.29	0.41
1:A:348:PHE:HE1	1:A:381:ALA:HB2	1.85	0.41
1:A:704:LEU:HD23	1:A:710:PHE:CG	2.55	0.41
1:A:772:GLU:N	1:A:772:GLU:OE1	2.53	0.41
1:A:1156:ALA:N	1:A:1159:SER:O	2.52	0.41
1:A:1576:GLY:N	1:A:1583:THR:O	2.52	0.41
1:A:1912:ASN:HA	1:A:1928:TYR:HA	2.01	0.41
1:A:1949:SER:HA	1:A:1963:ALA:HA	2.02	0.41
1:A:3500:VAL:HB	1:A:3509:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:3724:LYS:HE2	1:A:3731:ILE:HB	2.01	0.41
1:A:3905:LYS:HD3	1:A:3908:TYR:CE1	2.54	0.41
1:A:3962:GLY:HA2	1:A:3972:GLY:HA3	2.01	0.41
1:A:4038:ILE:HG23	1:A:4059:GLU:H	1.85	0.41
5:I:585:ILE:HG23	5:I:598:ILE:HG13	2.02	0.41
5:I:619:PHE:CE1	5:I:642:LEU:HD13	2.54	0.41
6:N:7:SER:N	6:N:21:SER:O	2.53	0.41
1:A:325:VAL:HG21	1:A:366:LEU:HD13	2.01	0.41
1:A:545:LEU:HD21	1:A:576:LYS:HD3	2.01	0.41
1:A:600:ILE:HG21	1:A:615:VAL:HG11	2.02	0.41
1:A:1032:THR:HG22	1:A:1052:LYS:HE3	2.02	0.41
1:A:1134:ARG:HH12	1:A:1155:THR:H	1.68	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1710:LEU:O	1:A:1729:PHE:N	2.53	0.41
1:A:2809:GLN:N	1:A:2829:LYS:O	2.34	0.41
1:A:2876:LYS:O	1:A:2882:THR:HG22	2.20	0.41
1:A:3348:ILE:HA	1:A:3372:SER:HB2	2.01	0.41
1:A:3958:TYR:OH	1:A:3960:GLU:OE1	2.22	0.41
2:H:64:VAL:HA	2:H:67:ARG:HG3	2.02	0.41
4:B:292:LEU:HD13	4:B:306:LEU:HD22	2.02	0.41
4:B:505:GLU:OE1	4:B:505:GLU:N	2.48	0.41
5:I:535:ASP:O	5:I:563:PRO:HG2	2.20	0.41
5:I:574:ARG:HA	5:I:589:ASP:HA	2.01	0.41
5:I:617:LYS:HB3	5:I:619:PHE:CZ	2.56	0.41
6:N:70:ILE:HD12	6:N:80:TYR:O	2.20	0.41
5:R:318:CYS:SG	5:R:322:ASN:ND2	2.93	0.41
1:A:1136:GLU:HG2	1:A:1151:ASP:HB3	2.03	0.41
1:A:1151:ASP:OD1	1:A:1152:SER:N	2.53	0.41
1:A:1452:LEU:HD13	1:A:1470:HIS:CG	2.55	0.41
1:A:1518:SER:HB3	1:A:1533:ILE:HG22	2.03	0.41
1:A:1597:LEU:HA	1:A:1617:GLY:O	2.19	0.41
1:A:2981:LEU:HD23	1:A:2981:LEU:H	1.85	0.41
1:A:3668:HIS:NE2	1:A:3670:ARG:HB3	2.34	0.41
1:A:3897:THR:O	1:A:3898:TRP:HD1	2.03	0.41
1:A:4002:ALA:HA	1:A:4008:THR:HA	2.01	0.41
2:H:36:TRP:CD2	2:H:81:LEU:HD22	2.55	0.41
2:H:39:GLN:HE21	2:H:45:LEU:HD22	1.84	0.41
3:L:41:TRP:CE3	3:L:94:CYS:HB3	2.55	0.41
4:B:47:GLU:O	4:B:50:PRO:HD2	2.20	0.41
4:B:83:PRO:O	4:B:88:GLN:NE2	2.53	0.41
4:B:134:ILE:HA	4:B:137:LEU:HG	2.02	0.41
5:I:485:HIS:CG	5:I:665:ASN:HA	2.56	0.41
1:A:181:THR:N	1:A:184:GLY:O	2.35	0.41
1:A:262:LYS:CD	1:A:281:GLN:HB2	2.50	0.41
1:A:356:ARG:HA	1:A:356:ARG:HD3	1.87	0.41
1:A:561:ALA:O	1:A:565:LEU:N	2.48	0.41
1:A:823:ASN:HB2	1:A:825:PHE:CZ	2.54	0.41
1:A:1395:SER:OG	1:A:1396:VAL:N	2.53	0.41
1:A:1433:SER:O	1:A:1435:ILE:N	2.52	0.41
1:A:1905:MET:N	1:A:1905:MET:SD	2.94	0.41
1:A:2040:LEU:HG	1:A:2042:MET:HB3	2.03	0.41
1:A:2769:PHE:HA	1:A:2799:SER:HA	2.01	0.41
1:A:3222:SER:O	1:A:3226:THR:OG1	2.27	0.41
1:A:3487:THR:HG21	1:A:3858:PRO:HG2	2.02	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3505:LEU:O	1:A:3507:ARG:NE	2.54	0.41
1:A:3901:SER:N	1:A:3912:VAL:O	2.53	0.41
2:H:169:LEU:H	2:H:169:LEU:HD23	1.86	0.41
3:L:68:PHE:CD1	3:L:81:ILE:HD12	2.54	0.41
4:B:526:TYR:HE1	4:B:531:LYS:HA	1.84	0.41
5:I:477:ASP:HB2	5:I:519:PRO:HB2	2.02	0.41
1:A:253:ARG:HB3	1:A:255:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:595:SER:HA	1:A:598:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:710:PHE:CE2	1:A:764:ASP:HB2	2.56	0.41
1:A:1186:THR:O	1:A:1190:THR:N	2.44	0.41
1:A:1667:LEU:HA	1:A:1687:ASN:O	2.21	0.41
1:A:3337:ILE:HG22	1:A:3356:LEU:HD23	2.02	0.41
1:A:3460:PHE:CE2	1:A:3462:TYR:HB3	2.55	0.41
1:A:4117:GLN:O	1:A:4121:ARG:HG2	2.20	0.41
4:B:142:LYS:HZ2	4:B:148:ALA:H	1.69	0.41
5:I:555:LEU:HD11	5:I:590:VAL:O	2.20	0.41
5:R:300:ARG:HH21	5:R:302:CYS:N	2.18	0.41
1:A:193:LYS:H	1:A:193:LYS:HG2	1.59	0.41
1:A:325:VAL:HG12	1:A:354:GLU:HB2	2.03	0.41
1:A:349:ASN:HD21	1:A:853:VAL:HG11	1.85	0.41
1:A:366:LEU:O	1:A:370:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:376:PRO:HA	1:A:379:LEU:HD12	2.01	0.41
1:A:449:VAL:HG11	1:A:463:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:914:HIS:HB3	1:A:925:ILE:HG22	2.02	0.41
1:A:2009:LEU:HB3	1:A:2057:PHE:HA	2.02	0.41
1:A:2054:ILE:HG13	1:A:2764:ILE:HG23	2.02	0.41
1:A:2777:ILE:HA	1:A:2790:ALA:O	2.20	0.41
1:A:2797:GLY:O	1:A:2806:PHE:N	2.53	0.41
1:A:3067:LYS:HB2	1:A:3092:ARG:HH12	1.86	0.41
1:A:3455:SER:HA	1:A:3482:SER:HA	2.01	0.41
1:A:3542:TRP:CE3	1:A:3571:LEU:HB2	2.55	0.41
1:A:3549:ASN:OD1	1:A:3550:PHE:N	2.54	0.41
1:A:3803:PRO:HG3	1:A:3810:PHE:HB2	2.02	0.41
1:A:3831:VAL:HB	1:A:3838:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:3928:LEU:HD13	1:A:3949:PHE:HB2	2.03	0.41
1:A:4025:TYR:HB2	1:A:4035:LYS:HB2	2.03	0.41
4:B:366:ALA:O	4:B:370:ILE:HG13	2.21	0.41
4:B:442:PHE:O	4:B:445:SER:HB2	2.21	0.41
5:I:403:PHE:CD2	5:I:646:LEU:HD13	2.51	0.41
5:I:630:SER:HB2	5:I:642:LEU:HB2	2.03	0.41
5:R:170:ASP:OD1	5:R:170:ASP:N	2.48	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:64:VAL:HG13	1:A:277:GLY:C	2.41	0.41
1:A:265:HIS:NE2	1:A:838:LEU:HD13	2.35	0.41
1:A:334:LYS:HB3	1:A:344:ARG:NH2	2.36	0.41
1:A:379:LEU:HD11	1:A:397:TRP:CE2	2.55	0.41
1:A:612:LYS:O	1:A:616:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:973:LEU:HB3	1:A:1005:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:1096:ILE:N	1:A:1108:GLY:O	2.51	0.41
1:A:2038:ASP:OD1	1:A:2043:ARG:NH2	2.53	0.41
1:A:2887:THR:HG21	1:A:2908:ASN:HB3	2.02	0.41
1:A:2894:ASN:OD1	1:A:2894:ASN:N	2.54	0.41
1:A:2985:LYS:HD2	1:A:2985:LYS:HA	1.78	0.41
1:A:3563:TRP:HD1	1:A:3587:ALA:H	1.66	0.41
1:A:3935:LYS:HG2	1:A:3942:ALA:HB3	2.02	0.41
1:A:4138:THR:HG21	1:A:4474:GLN:HG2	2.03	0.41
2:H:67:ARG:HD2	4:B:462:LYS:HZ1	1.86	0.41
2:H:100:PRO:HB2	2:H:103:ASP:OD1	2.21	0.41
2:H:209:ASN:HA	2:H:215:THR:O	2.21	0.41
5:I:434:THR:HG21	5:I:655:PHE:HB3	2.03	0.41
5:I:569:ASP:HB3	5:I:654:LEU:HD23	2.01	0.41
5:I:586:SER:HB3	5:I:597:THR:HG23	2.01	0.41
6:N:92:ALA:HB3	6:N:94:TYR:CE1	2.55	0.41
5:R:89:CYS:N	5:R:101:GLU:OE2	2.53	0.41
1:A:134:ALA:HB2	1:A:299:PHE:HZ	1.86	0.41
1:A:219:ARG:NH1	1:A:229:LYS:HE2	2.36	0.41
1:A:1023:GLN:NE2	1:A:1030:VAL:O	2.53	0.41
1:A:1276:ASN:HB2	1:A:1278:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:1362:VAL:H	1:A:1369:TRP:HE3	1.69	0.41
1:A:1378:THR:HG21	1:A:1386:ARG:CZ	2.51	0.41
1:A:1798:ASN:HA	1:A:1811:ASN:HB3	2.02	0.41
1:A:1859:VAL:HG22	1:A:1860:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:1968:VAL:HG22	1:A:1981:TRP:HA	2.02	0.41
1:A:2813:GLN:HB2	1:A:2825:LYS:HB2	2.03	0.41
1:A:2923:SER:HB3	1:A:2946:ILE:HB	2.01	0.41
1:A:2947:SER:O	1:A:2957:PHE:HA	2.20	0.41
1:A:3095:GLN:N	1:A:3095:GLN:OE1	2.54	0.41
1:A:3268:SER:N	1:A:3274:PHE:O	2.54	0.41
1:A:3673:LYS:HZ1	1:A:3696:ILE:CG1	2.34	0.41
1:A:3703:ARG:HE	1:A:3890:ASP:HB2	1.86	0.41
1:A:3715:ASN:ND2	1:A:3805:ASP:O	2.54	0.41
1:A:3798:THR:HG23	1:A:3811:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:3891:SER:OG	1:A:3894:TYR:O	2.38	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3997:ILE:HB	1:A:4013:MET:HB3	2.02	0.41
1:A:4026:TYR:O	1:A:4036:LEU:N	2.54	0.41
2:H:74:ASN:C	2:H:74:ASN:HD22	2.23	0.41
2:H:174:HIS:CD2	2:H:193:THR:H	2.39	0.41
4:B:418:SER:HB2	4:B:421:GLN:HE22	1.86	0.41
5:I:530:PHE:HA	5:I:545:GLY:C	2.41	0.41
1:A:54:TYR:CE2	1:A:256:VAL:HB	2.56	0.41
1:A:810:PRO:O	1:A:813:ILE:HG22	2.20	0.41
1:A:846:LEU:HD13	1:A:889:ILE:HA	2.03	0.41
1:A:881:VAL:HB	1:A:905:PHE:HB2	2.02	0.41
1:A:931:ARG:HH22	1:A:934:LYS:HG3	1.86	0.41
1:A:1032:THR:HB	1:A:1034:LYS:NZ	2.36	0.41
1:A:1124:ILE:O	1:A:1132:GLU:HA	2.21	0.41
1:A:1606:TYR:O	1:A:1609:LEU:HD13	2.21	0.41
1:A:1779:PHE:H	1:A:1802:LYS:HB3	1.84	0.41
1:A:1855:THR:OG1	1:A:1866:HIS:HB3	2.21	0.41
1:A:1939:ALA:HA	1:A:2738:ILE:HG13	2.01	0.41
1:A:2834:TYR:O	1:A:2860:LEU:HA	2.21	0.41
1:A:2909:GLU:O	1:A:2924:SER:N	2.54	0.41
1:A:3217:ASP:OD1	1:A:3217:ASP:N	2.51	0.41
1:A:3394:LYS:HG3	5:R:214:TRP:CZ2	2.56	0.41
1:A:3443:GLU:OE1	1:A:3443:GLU:N	2.53	0.41
1:A:3543:ASN:O	1:A:3570:HIS:N	2.43	0.41
1:A:3624:ALA:HA	1:A:3629:GLN:HA	2.02	0.41
1:A:3811:PHE:HD2	1:A:3871:VAL:HB	1.85	0.41
1:A:3970:TRP:HE3	1:A:3992:LYS:HD3	1.85	0.41
1:A:4018:ASP:O	1:A:4044:ARG:HA	2.21	0.41
2:H:29:PHE:HD2	2:H:74:ASN:O	2.04	0.41
2:H:39:GLN:HG2	2:H:45:LEU:HD22	2.03	0.41
2:H:61:GLY:O	2:H:65:LYS:N	2.54	0.41
2:H:130:SER:OG	2:H:153:LYS:HB3	2.20	0.41
4:B:18:GLY:HA3	4:B:295:VAL:O	2.21	0.41
4:B:49:PHE:HZ	4:B:269:ASN:HA	1.84	0.41
4:B:66:HIS:H	4:B:66:HIS:CD2	2.39	0.41
4:B:90:LYS:O	4:B:307:LYS:HG2	2.20	0.41
4:B:378:GLN:O	4:B:382:PHE:N	2.49	0.41
5:I:494:VAL:HB	5:I:497:THR:OG1	2.21	0.41
5:I:607:HIS:O	5:I:609:PHE:N	2.53	0.41
5:R:208:GLU:HG3	5:R:210:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:318:PRO:HG3	1:A:359:SER:H	1.84	0.41
1:A:463:LEU:HD23	1:A:466:ILE:HD12	2.03	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:869:MET:HG2	1:A:917:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:3057:LYS:HG2	1:A:3066:GLY:O	2.21	0.41
1:A:3428:THR:HA	1:A:3441:LYS:HD2	2.02	0.41
1:A:3560:TYR:HE1	5:R:311:LYS:HD3	1.84	0.41
1:A:3638:ARG:HA	1:A:3638:ARG:HD3	1.85	0.41
1:A:4038:ILE:HG13	1:A:4062:ALA:HB3	2.03	0.41
2:H:148:LEU:H	2:H:148:LEU:HD23	1.85	0.41
3:L:12:ALA:HB1	3:L:112:LYS:HE3	2.03	0.41
4:B:110:ILE:HB	4:B:264:LEU:HG	2.03	0.41
4:B:110:ILE:HD11	4:B:266:ALA:HB2	2.03	0.41
4:B:456:VAL:O	4:B:460:ALA:N	2.26	0.41
5:I:585:ILE:HG22	5:I:599:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:218:ILE:H	1:A:836:PHE:HB2	1.86	0.40
1:A:356:ARG:NH2	1:A:384:GLN:O	2.53	0.40
1:A:802:GLY:O	1:A:805:THR:OG1	2.29	0.40
1:A:1425:SER:OG	1:A:1436:LYS:HD2	2.21	0.40
1:A:1470:HIS:CE1	1:A:1472:ASP:HB2	2.56	0.40
1:A:1693:HIS:CD2	1:A:1719:LEU:H	2.39	0.40
1:A:1909:ALA:HB3	1:A:1931:PHE:CD2	2.56	0.40
1:A:2069:ILE:N	1:A:2750:ILE:O	2.33	0.40
1:A:3102:PHE:HA	7:G:1:NAG:H82	2.03	0.40
1:A:3409:SER:N	1:A:3428:THR:HB	2.37	0.40
1:A:3452:PRO:CB	1:A:3485:SER:H	2.32	0.40
1:A:3479:HIS:NE2	1:A:3496:THR:HG22	2.36	0.40
1:A:3926:TYR:HB3	1:A:3951:HIS:CD2	2.53	0.40
2:H:2:VAL:HG21	2:H:98:ARG:CZ	2.50	0.40
4:B:401:LYS:HE2	4:B:401:LYS:HB3	1.79	0.40
6:N:82:GLN:HE22	6:N:84:ASN:HB3	1.86	0.40
1:A:529:GLN:HA	1:A:532:ARG:CB	2.51	0.40
1:A:537:LYS:HD3	1:A:537:LYS:HA	1.95	0.40
1:A:1278:PHE:O	1:A:1365:ASN:N	2.54	0.40
1:A:1409:GLU:N	1:A:1421:SER:OG	2.53	0.40
1:A:2826:GLU:OE1	1:A:2841:SER:N	2.54	0.40
1:A:2915:LYS:HB2	1:A:2915:LYS:HE2	1.94	0.40
1:A:3047:THR:HA	1:A:3077:PHE:HA	2.02	0.40
1:A:3291:ARG:HH12	1:A:3293:PRO:HA	1.86	0.40
1:A:3461:LYS:HG3	1:A:3476:ALA:HB2	2.03	0.40
1:A:3970:TRP:HZ3	1:A:3992:LYS:H	1.70	0.40
2:H:84:ASN:HB3	4:B:442:PHE:CZ	2.57	0.40
3:L:29:ILE:HB	3:L:37:THR:OG1	2.20	0.40
4:B:13:ILE:HD12	4:B:63:PHE:HD2	1.86	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
4:B:66:HIS:CD2	4:B:263:VAL:H	2.40	0.40
4:B:237:ILE:HG13	4:B:242:VAL:HB	2.03	0.40
5:I:414:LEU:HD11	5:I:614:PHE:CD2	2.56	0.40
5:I:441:ILE:HG13	5:I:441:ILE:O	2.21	0.40
5:I:521:ALA:HB3	5:I:534:THR:HG21	2.02	0.40
5:R:167:CYS:H	5:R:178:ASP:HB2	1.86	0.40
1:A:180:ASP:OD1	1:A:180:ASP:N	2.52	0.40
1:A:531:LEU:HD12	1:A:564:MET:HG2	2.03	0.40
1:A:1602:TYR:HB3	1:A:1613:SER:N	2.25	0.40
1:A:1909:ALA:HB3	1:A:1931:PHE:HD2	1.85	0.40
1:A:1953:HIS:CD2	1:A:1957:ARG:HE	2.39	0.40
1:A:2432:TYR:CE2	1:A:2726:LEU:HB2	2.56	0.40
1:A:3152:LEU:HD12	1:A:3152:LEU:HA	1.84	0.40
1:A:3351:ASN:OD1	1:A:3351:ASN:N	2.55	0.40
1:A:3440:PHE:HB2	1:A:3460:PHE:HD1	1.86	0.40
1:A:3560:TYR:HE2	1:A:3562:LEU:HB2	1.85	0.40
4:B:12:TRP:CH2	4:B:59:PRO:HD3	2.56	0.40
4:B:527:ASP:OD1	4:B:527:ASP:N	2.50	0.40
5:I:577:TRP:CZ2	5:I:588:ILE:HD13	2.56	0.40
1:A:371:ILE:HG21	1:A:397:TRP:CD1	2.56	0.40
1:A:864:LEU:HD22	1:A:871:ALA:HA	2.02	0.40
1:A:890:ILE:CG1	1:A:897:SER:H	2.33	0.40
1:A:1076:ILE:O	1:A:1097:GLN:HB2	2.21	0.40
1:A:1284:ARG:O	1:A:1359:SER:N	2.43	0.40
1:A:1489:GLN:HE21	1:A:1498:LYS:HE2	1.87	0.40
1:A:1827:LEU:HD11	1:A:1838:HIS:HB3	2.02	0.40
1:A:2431:ASP:HB3	1:A:2434:GLN:OE1	2.21	0.40
1:A:2839:HIS:CE1	1:A:2856:THR:HG1	2.40	0.40
1:A:3009:LEU:HD22	1:A:3013:GLY:HA3	2.03	0.40
1:A:4081:LEU:O	1:A:4085:VAL:HG22	2.21	0.40
2:H:153:LYS:HG3	2:H:154:ASP:CG	2.41	0.40
2:H:154:ASP:N	2:H:186:TYR:O	2.48	0.40
4:B:234:TRP:HH2	4:B:322:THR:HG21	1.85	0.40
5:I:525:ASP:N	5:I:530:PHE:O	2.37	0.40
5:I:526:PRO:HD2	5:I:570:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:192:VAL:HG13	1:A:202:GLU:O	2.20	0.40
1:A:295:ASN:HB2	5:I:607:HIS:CE1	2.57	0.40
1:A:409:ASP:CG	1:A:436:GLN:HG3	2.42	0.40
1:A:544:LEU:HD22	1:A:565:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:566:MET:CE	1:A:596:HIS:HB3	2.51	0.40
1:A:847:GLN:HE21	1:A:888:GLY:HA3	1.86	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:927:PRO:HA	1:A:1013:GLN:HA	2.04	0.40
1:A:1974:PRO:HB2	1:A:2741:PHE:HZ	1.85	0.40
1:A:3276:LYS:HD2	1:A:3276:LYS:HA	1.93	0.40
1:A:3461:LYS:HE3	1:A:3476:ALA:HB1	2.04	0.40
1:A:4082:TYR:O	1:A:4086:ASN:N	2.53	0.40
2:H:110:MET:HG2	2:H:113:TRP:CZ3	2.57	0.40
2:H:163:SER:OG	2:H:207:ASN:HB2	2.22	0.40
4:B:243:ASN:OD1	4:B:243:ASN:N	2.54	0.40
4:B:296:ASN:HD22	4:B:297:LYS:NZ	2.19	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	3450/4563 (76%)	3221 (93%)	229 (7%)	0	100	100
2	H	197/234 (84%)	182 (92%)	15 (8%)	0	100	100
3	L	188/219 (86%)	179 (95%)	9 (5%)	0	100	100
4	B	508/545 (93%)	479 (94%)	29 (6%)	0	100	100
5	I	252/860 (29%)	212 (84%)	40 (16%)	0	100	100
5	R	263/860 (31%)	225 (86%)	37 (14%)	1 (0%)	30	68
6	N	126/131 (96%)	112 (89%)	14 (11%)	0	100	100
All	All	4984/7412 (67%)	4610 (92%)	373 (8%)	1 (0%)	100	100

All (1) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
5	R	298	MET

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	3013/4080 (74%)	2993 (99%)	20 (1%)	81	87
2	H	169/199 (85%)	168 (99%)	1 (1%)	84	88
3	L	145/192 (76%)	145 (100%)	0	100	100
4	B	408/433 (94%)	407 (100%)	1 (0%)	92	94
5	I	201/755 (27%)	200 (100%)	1 (0%)	86	89
5	R	204/755 (27%)	203 (100%)	1 (0%)	86	89
6	N	80/103 (78%)	79 (99%)	1 (1%)	65	77
All	All	4220/6517 (65%)	4195 (99%)	25 (1%)	82	88

All (25) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	79	LYS
1	A	613	LYS
1	A	930	LYS
1	A	1043	LYS
1	A	1134	ARG
1	A	1164	ARG
1	A	1202	LYS
1	A	1450	LYS
1	A	1586	LYS
1	A	1867	ARG
1	A	2002	LYS
1	A	2418	LYS
1	A	2836	ARG
1	A	2969	ARG
1	A	3386	ARG
1	A	3404	LYS
1	A	3507	ARG
1	A	3670	ARG
1	A	3762	LYS
1	A	4132	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
2	H	74	ASN
4	B	518	ASN
5	I	520	ARG
6	N	53	PRO
5	R	351	ARG

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	155	ASN
1	A	243	GLN
1	A	295	ASN
1	A	340	GLN
1	A	346	ASN
1	A	349	ASN
1	A	380	GLN
1	A	541	GLN
1	A	596	HIS
1	A	636	ASN
1	A	708	GLN
1	A	828	HIS
1	A	886	ASN
1	A	904	ASN
1	A	959	ASN
1	A	1023	GLN
1	A	1098	ASN
1	A	1464	GLN
1	A	1506	GLN
1	A	1693	HIS
1	A	1944	HIS
1	A	1994	GLN
1	A	2064	GLN
1	A	3618	GLN
1	A	4142	GLN
1	A	4474	GLN
2	H	35	HIS
3	L	143	ASN
4	B	66	HIS
4	B	296	ASN
4	B	407	GLN
4	B	438	GLN
5	I	564	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
6	N	115	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates ⓘ

2 monosaccharides are modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
7	NAG	G	1	1,7	14,14,15	1.25	2 (14%)	17,19,21	2.09	2 (11%)
7	NAG	G	2	7	14,14,15	0.41	0	17,19,21	0.55	0

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
7	NAG	G	1	1,7	-	2/6/23/26	0/1/1/1
7	NAG	G	2	7	-	2/6/23/26	0/1/1/1

All (2) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
7	G	1	NAG	O5-C1	4.01	1.50	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
7	G	1	NAG	C1-C2	2.05	1.55	1.52

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
7	G	1	NAG	C1-O5-C5	7.75	122.58	112.19
7	G	1	NAG	C1-C2-N2	2.41	114.23	110.43

There are no chirality outliers.

All (4) torsion outliers are listed below:

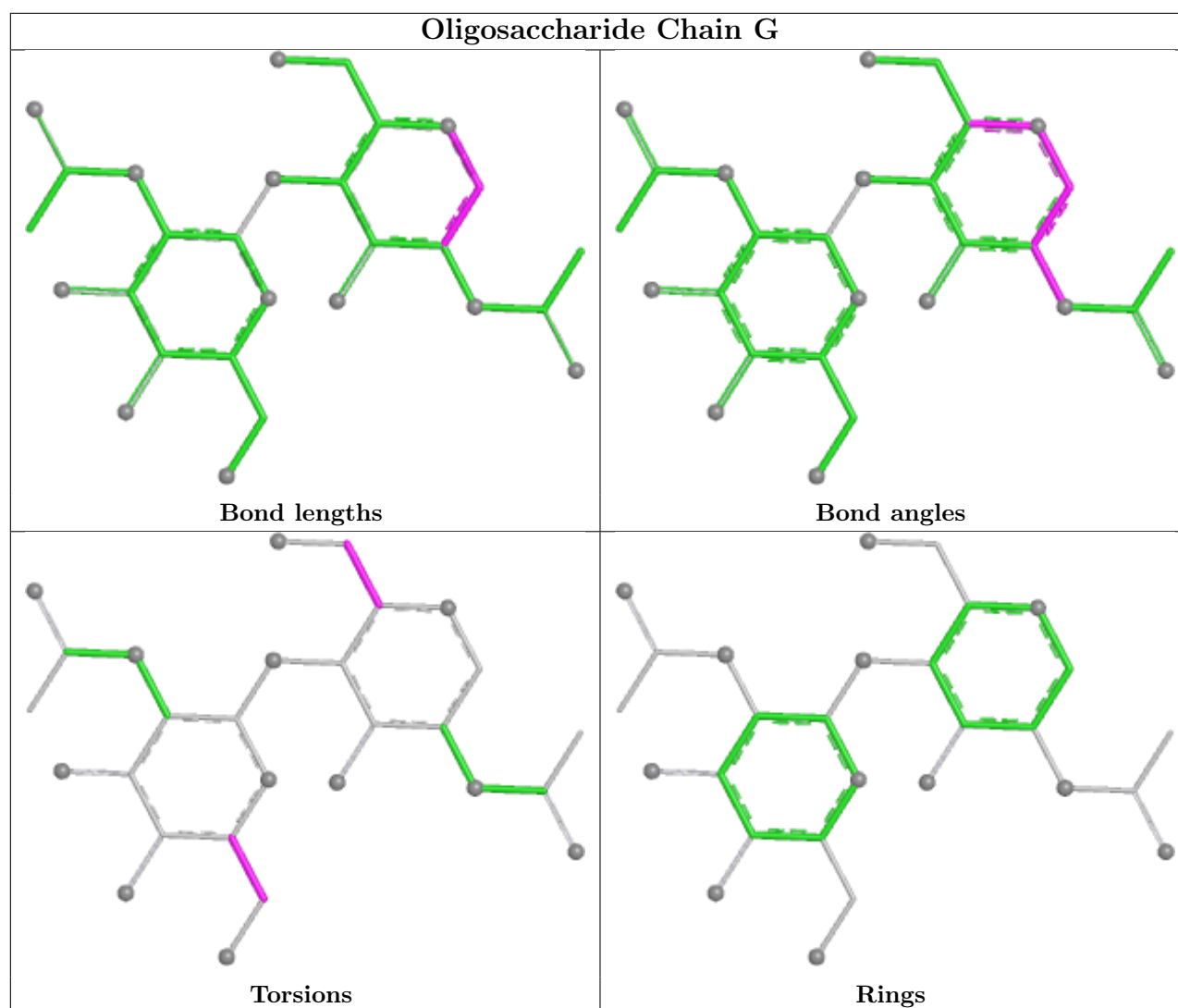
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
7	G	2	NAG	C4-C5-C6-O6
7	G	2	NAG	O5-C5-C6-O6
7	G	1	NAG	C4-C5-C6-O6
7	G	1	NAG	O5-C5-C6-O6

There are no ring outliers.

1 monomer is involved in 1 short contact:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
7	G	1	NAG	1	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for oligosaccharide.



5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 11 ligands modelled in this entry, 7 are monoatomic - leaving 4 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	$\# Z > 2$	Counts	RMSZ	$\# Z > 2$
8	NAG	A	4603	1	14,14,15	0.24	0	17,19,21	0.47	0
8	NAG	A	4601	1	14,14,15	0.27	0	17,19,21	0.46	0
8	NAG	A	4602	1	14,14,15	0.31	0	17,19,21	0.44	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
8	NAG	A	4604	1	14,14,15	0.37	0	17,19,21	1.33	2 (11%)

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

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
8	NAG	A	4603	1	-	4/6/23/26	0/1/1/1
8	NAG	A	4601	1	-	2/6/23/26	0/1/1/1
8	NAG	A	4602	1	-	0/6/23/26	0/1/1/1
8	NAG	A	4604	1	-	5/6/23/26	0/1/1/1

There are no bond length outliers.

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
8	A	4604	NAG	C2-N2-C7	4.62	129.09	122.90
8	A	4604	NAG	C1-C2-N2	2.03	113.64	110.43

There are no chirality outliers.

All (11) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
8	A	4603	NAG	C4-C5-C6-O6
8	A	4601	NAG	C4-C5-C6-O6
8	A	4603	NAG	O5-C5-C6-O6
8	A	4601	NAG	O5-C5-C6-O6
8	A	4603	NAG	C8-C7-N2-C2
8	A	4603	NAG	O7-C7-N2-C2
8	A	4604	NAG	C8-C7-N2-C2
8	A	4604	NAG	O7-C7-N2-C2
8	A	4604	NAG	O5-C5-C6-O6
8	A	4604	NAG	C1-C2-N2-C7
8	A	4604	NAG	C3-C2-N2-C7

There are no ring outliers.

3 monomers are involved in 4 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
8	A	4601	NAG	1	0
8	A	4602	NAG	2	0
8	A	4604	NAG	1	0

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.

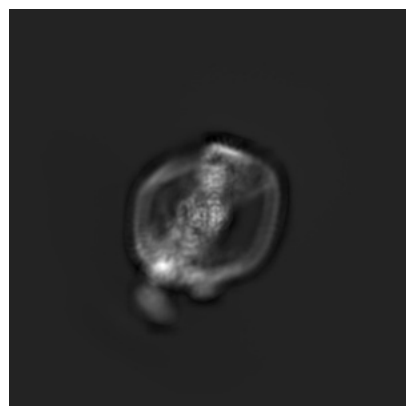
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-44469. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

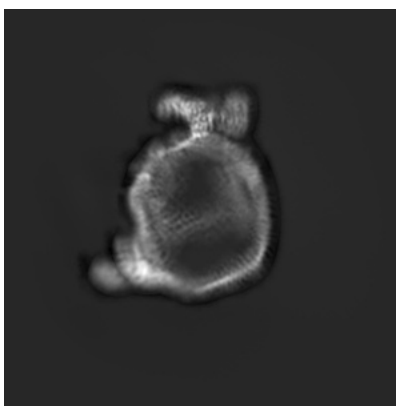
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

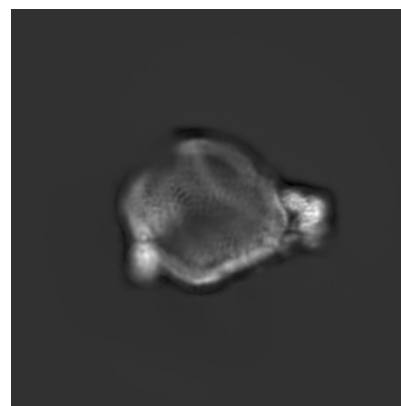
6.1.1 Primary map



X

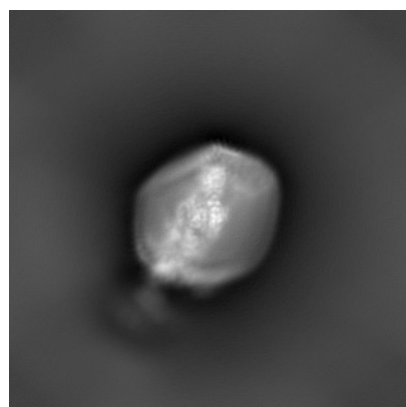


Y

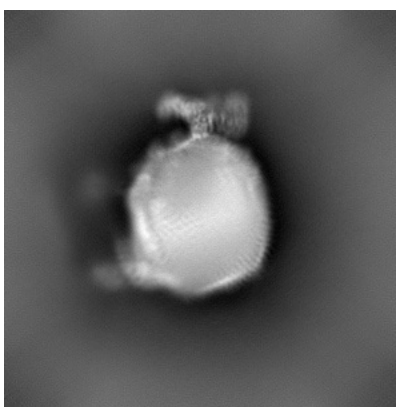


Z

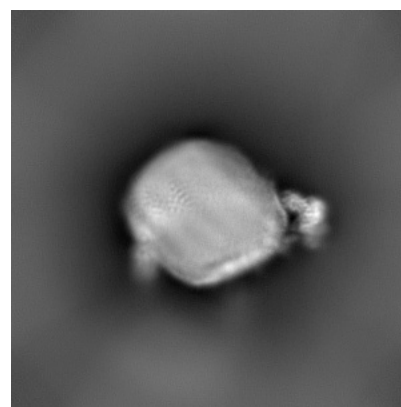
6.1.2 Raw map



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: 168

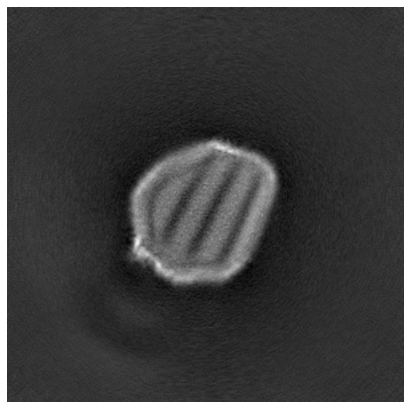


Y Index: 168

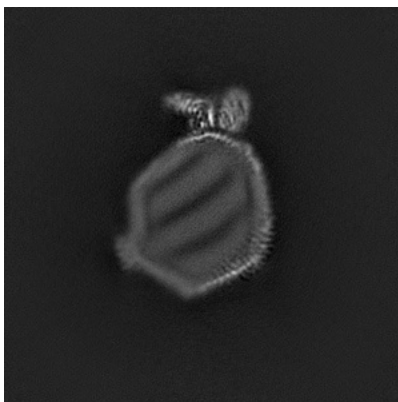


Z Index: 168

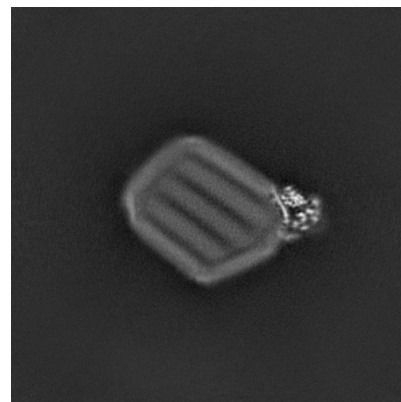
6.2.2 Raw map



X Index: 168



Y Index: 168



Z Index: 168

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

6.3 Largest variance slices [i](#)

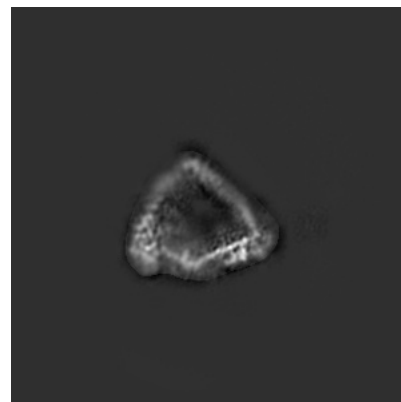
6.3.1 Primary map



X Index: 112

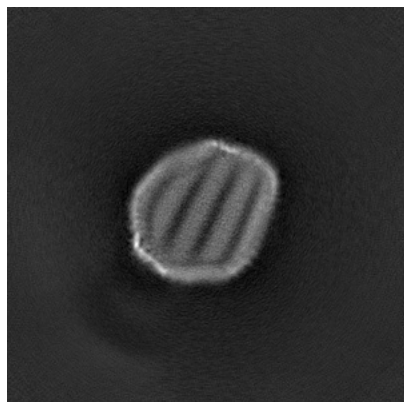


Y Index: 171

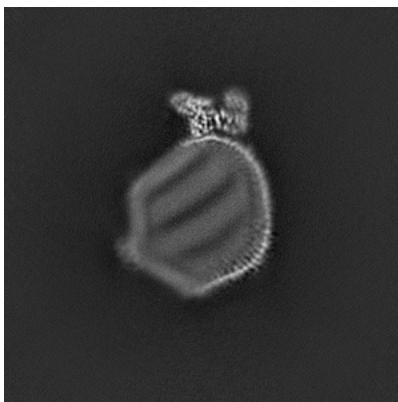


Z Index: 120

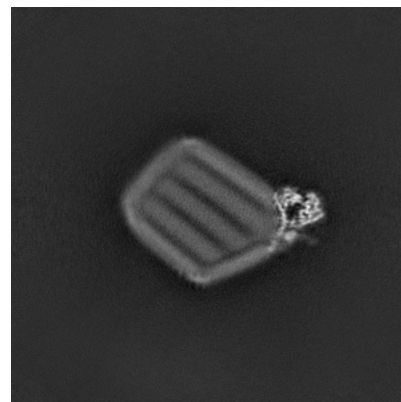
6.3.2 Raw map



X Index: 164



Y Index: 172

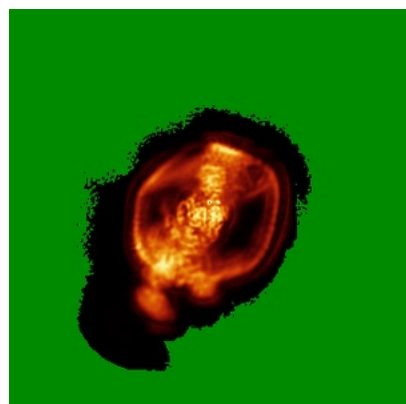


Z Index: 160

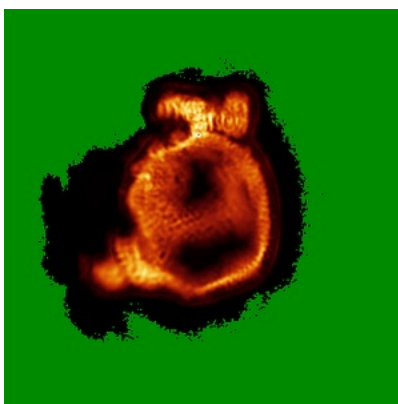
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

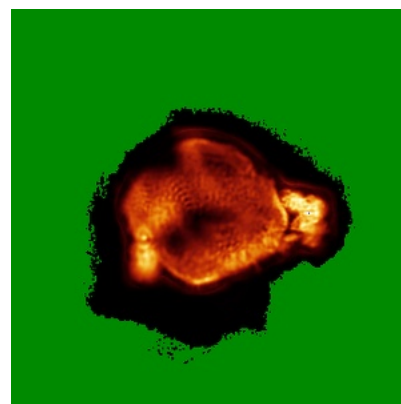
6.4.1 Primary map



X

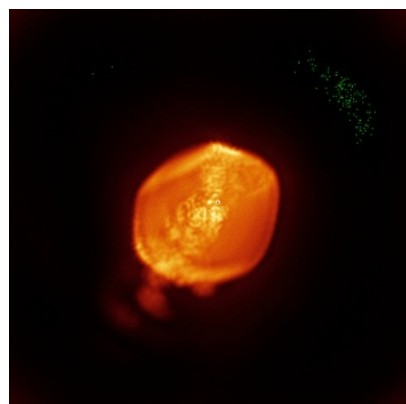


Y

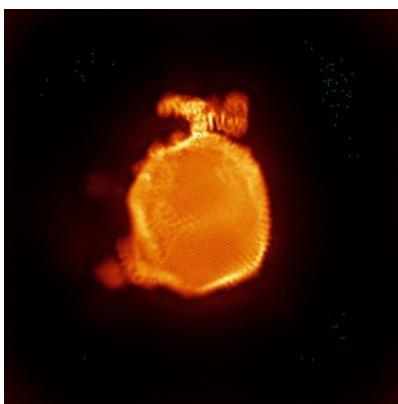


Z

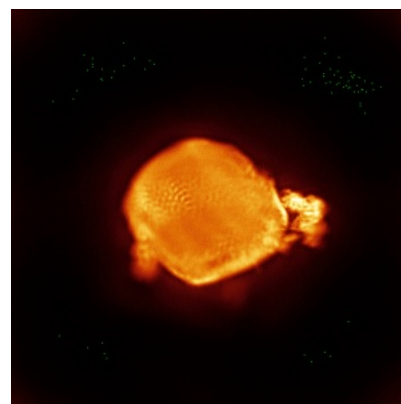
6.4.2 Raw map



X



Y



Z

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

6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.1. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

6.5.2 Raw map



These images show the 3D surface of the raw map. The raw map's contour level was selected so that its surface encloses the same volume as the primary map does at its recommended contour level.

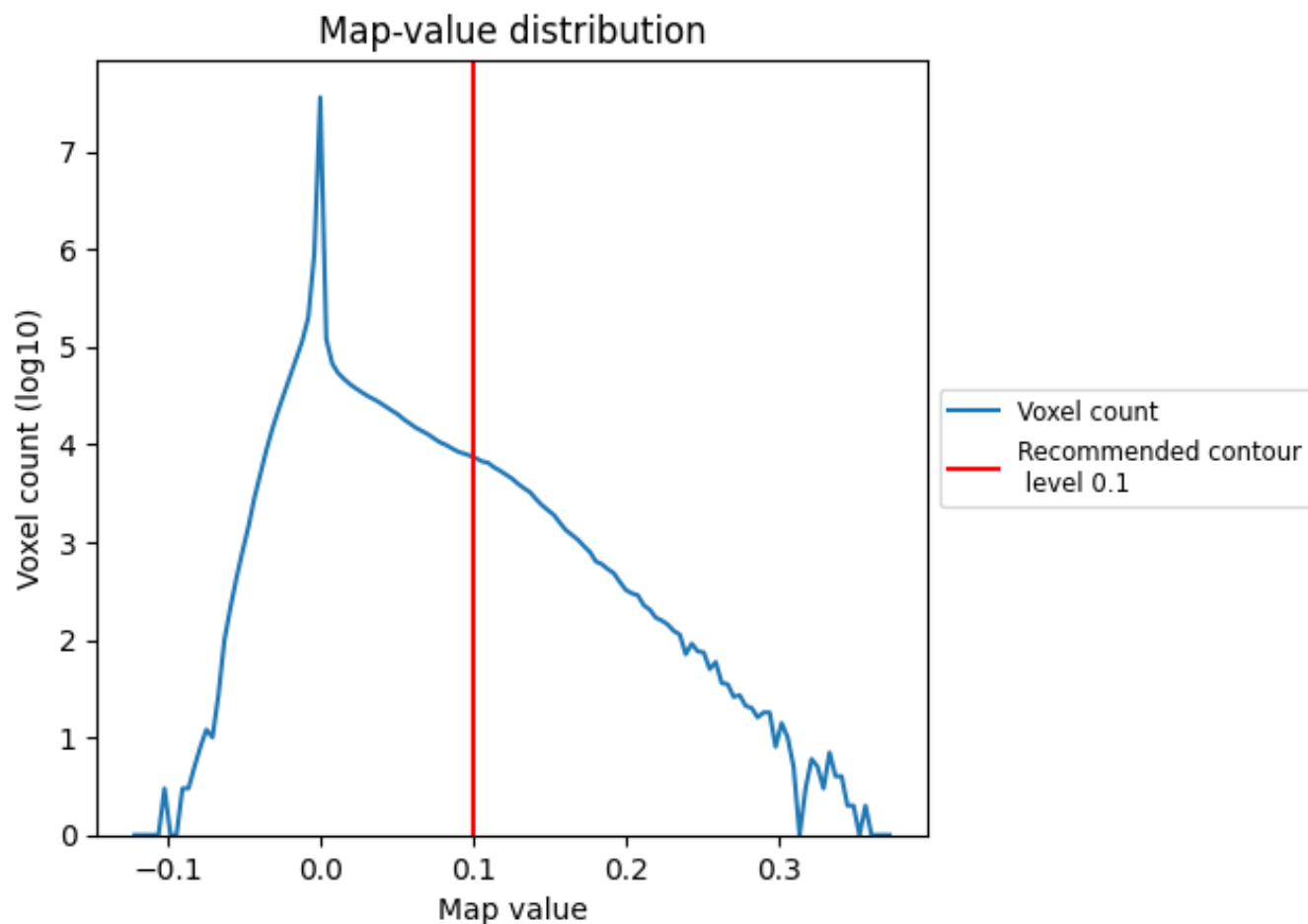
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

7 Map analysis [i](#)

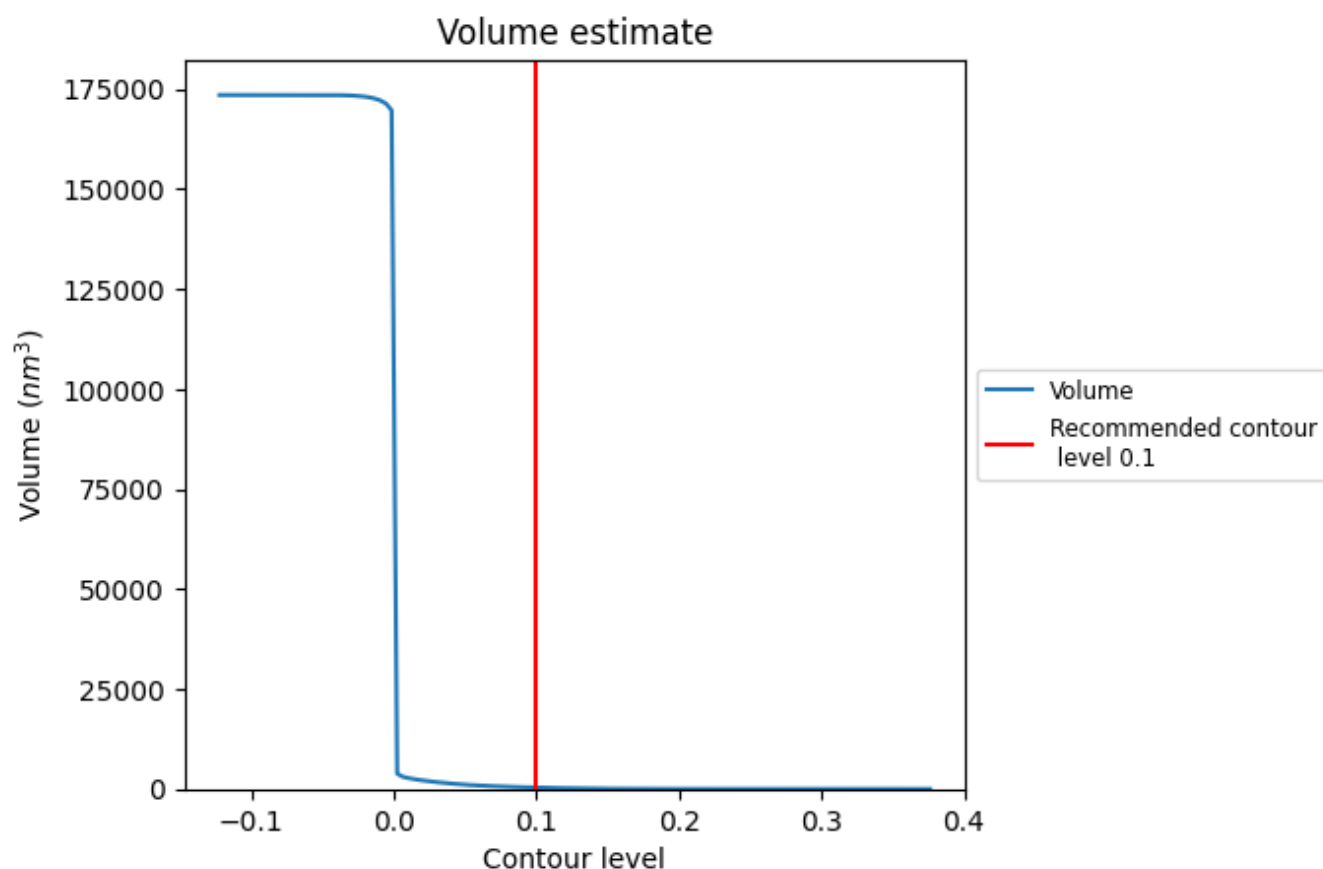
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



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

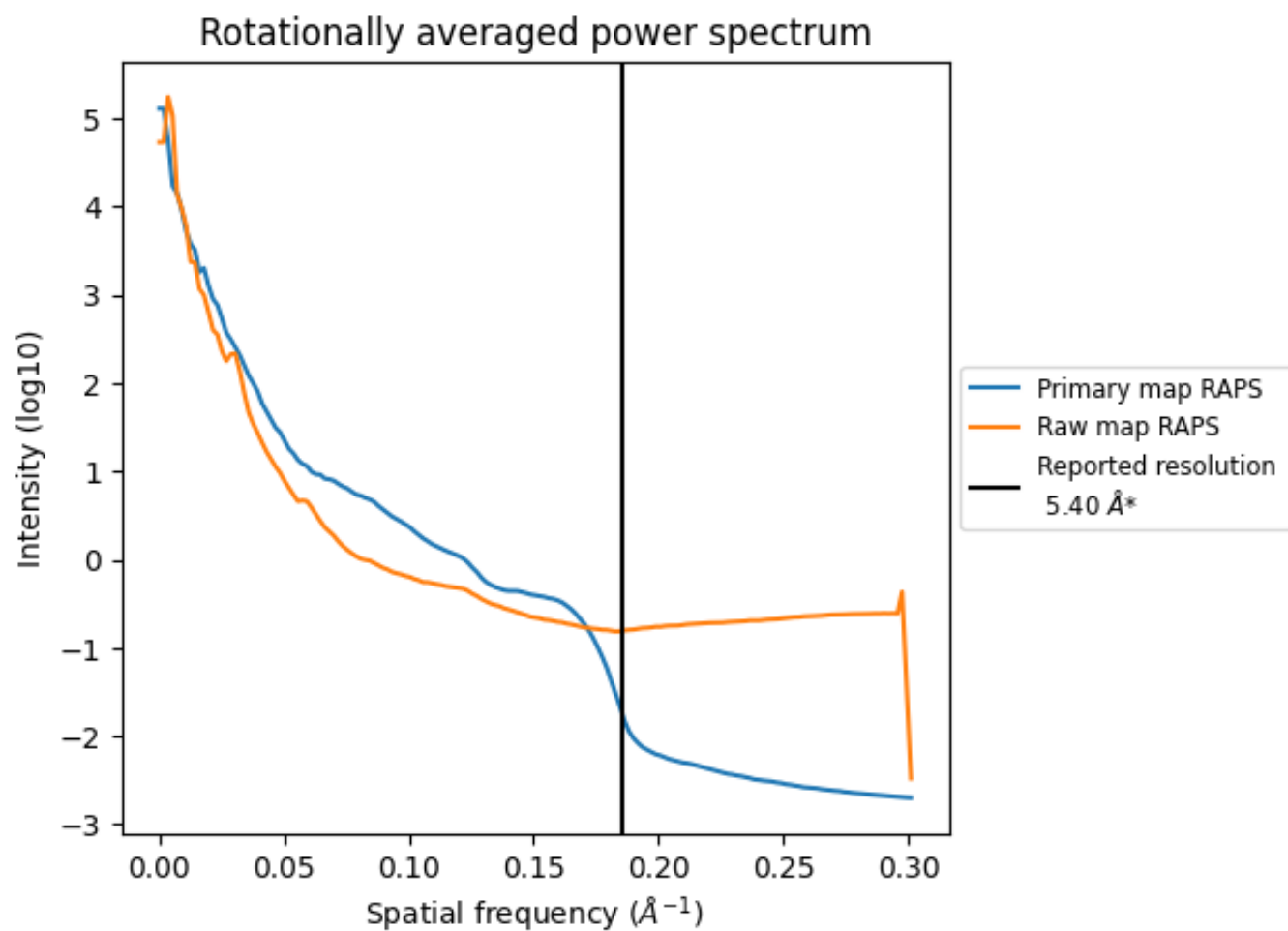
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 346 nm^3 ; this corresponds to an approximate mass of 313 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 ⓘ

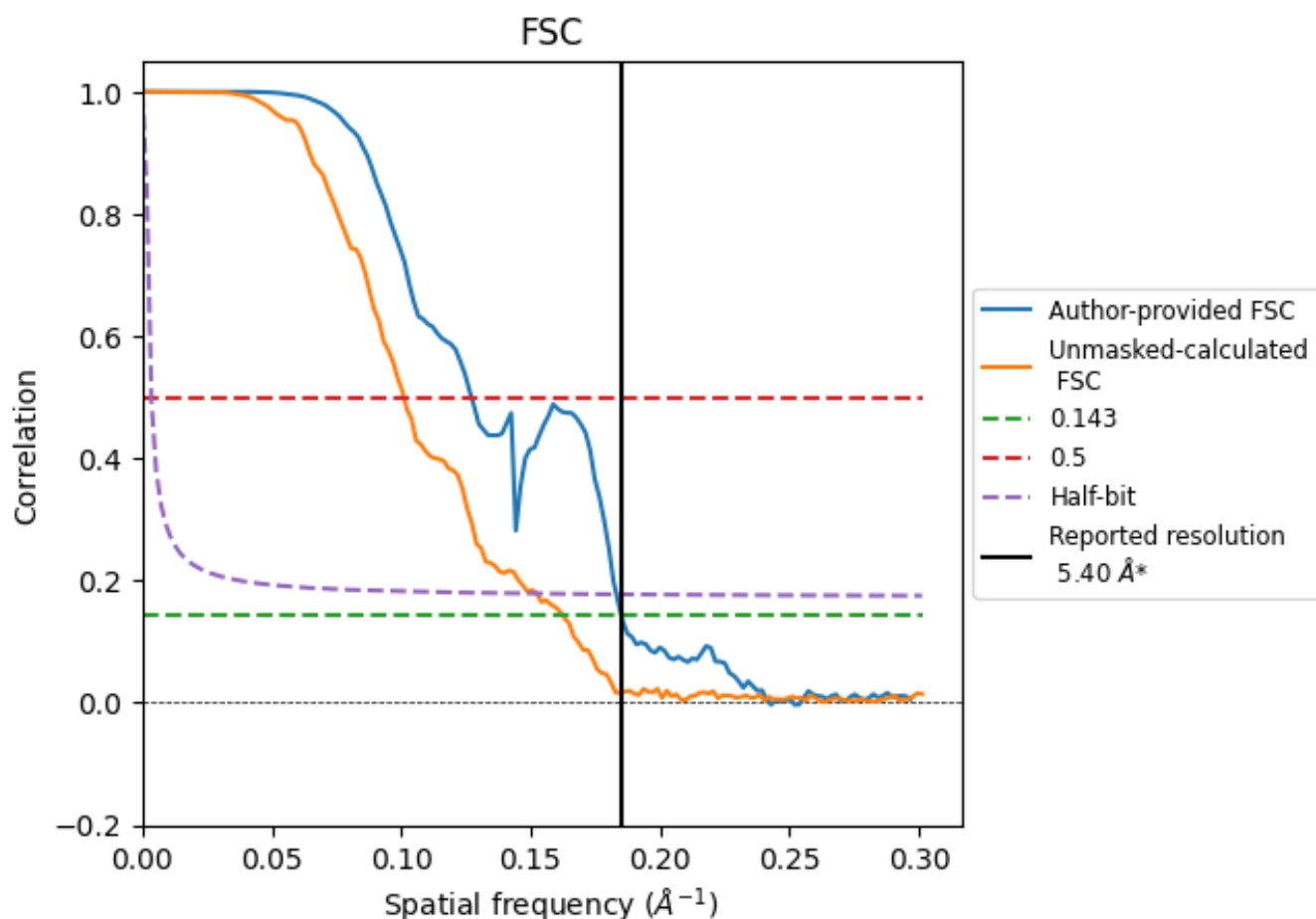


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.185 $\text{\AA}^{-1}$

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 $0.185 \text{ \AA}^{-1}$

8.2 Resolution estimates [i](#)

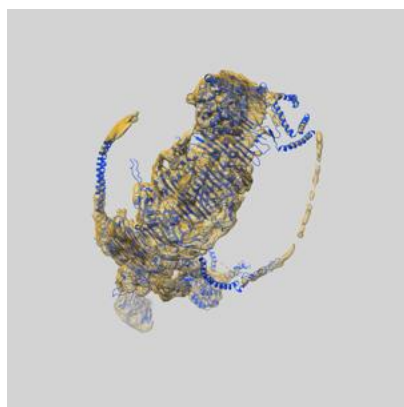
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	5.40	-	-
Author-provided FSC curve	5.41	7.87	5.46
Unmasked-calculated*	6.16	9.90	6.56

*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 6.16 differs from the reported value 5.4 by more than 10 %

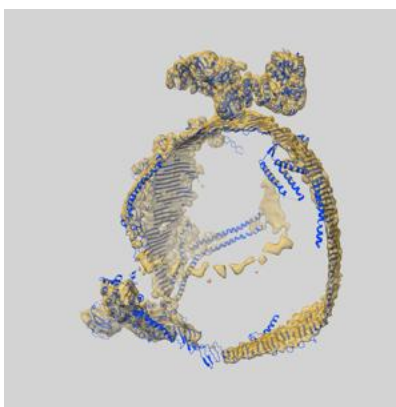
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-44469 and PDB model 9BDT. Per-residue inclusion information can be found in section [3](#) on page [7](#).

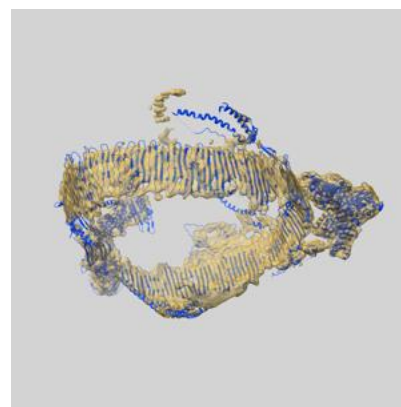
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



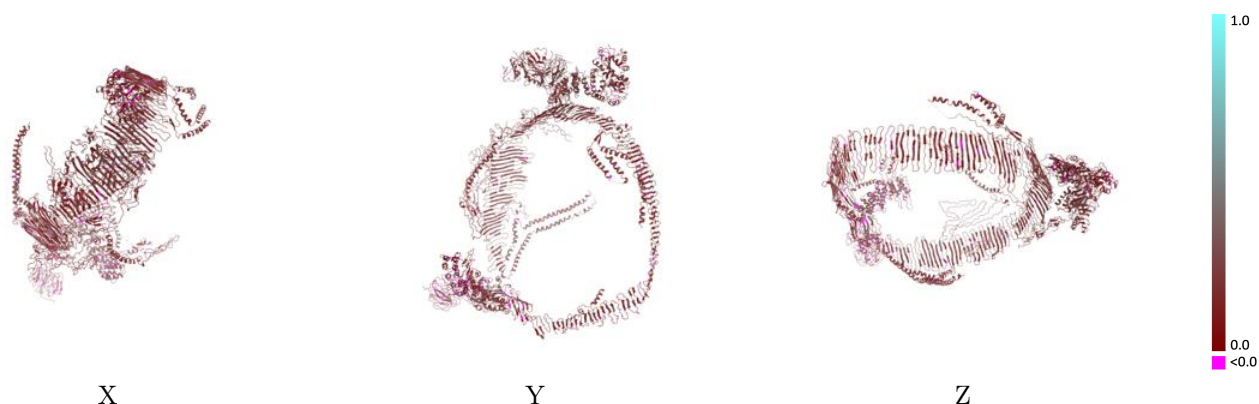
Y



Z

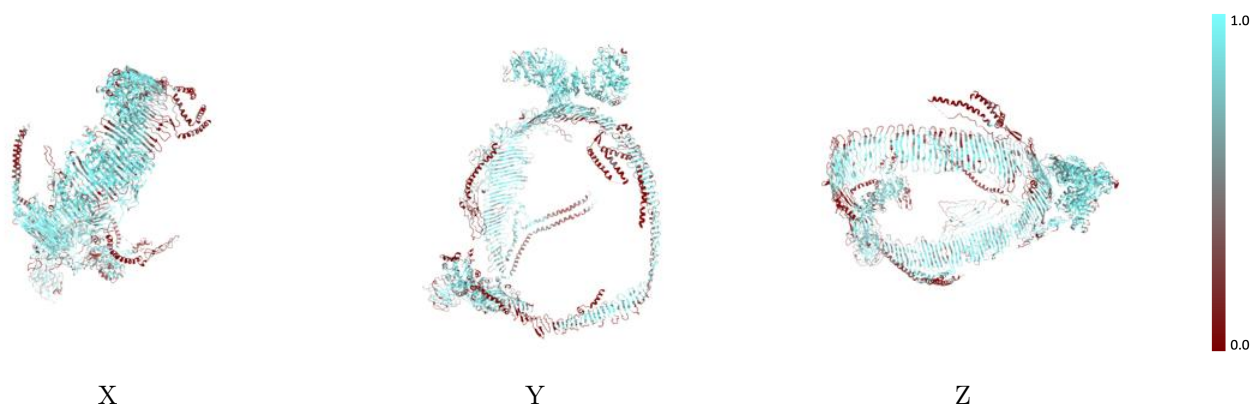
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.1 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



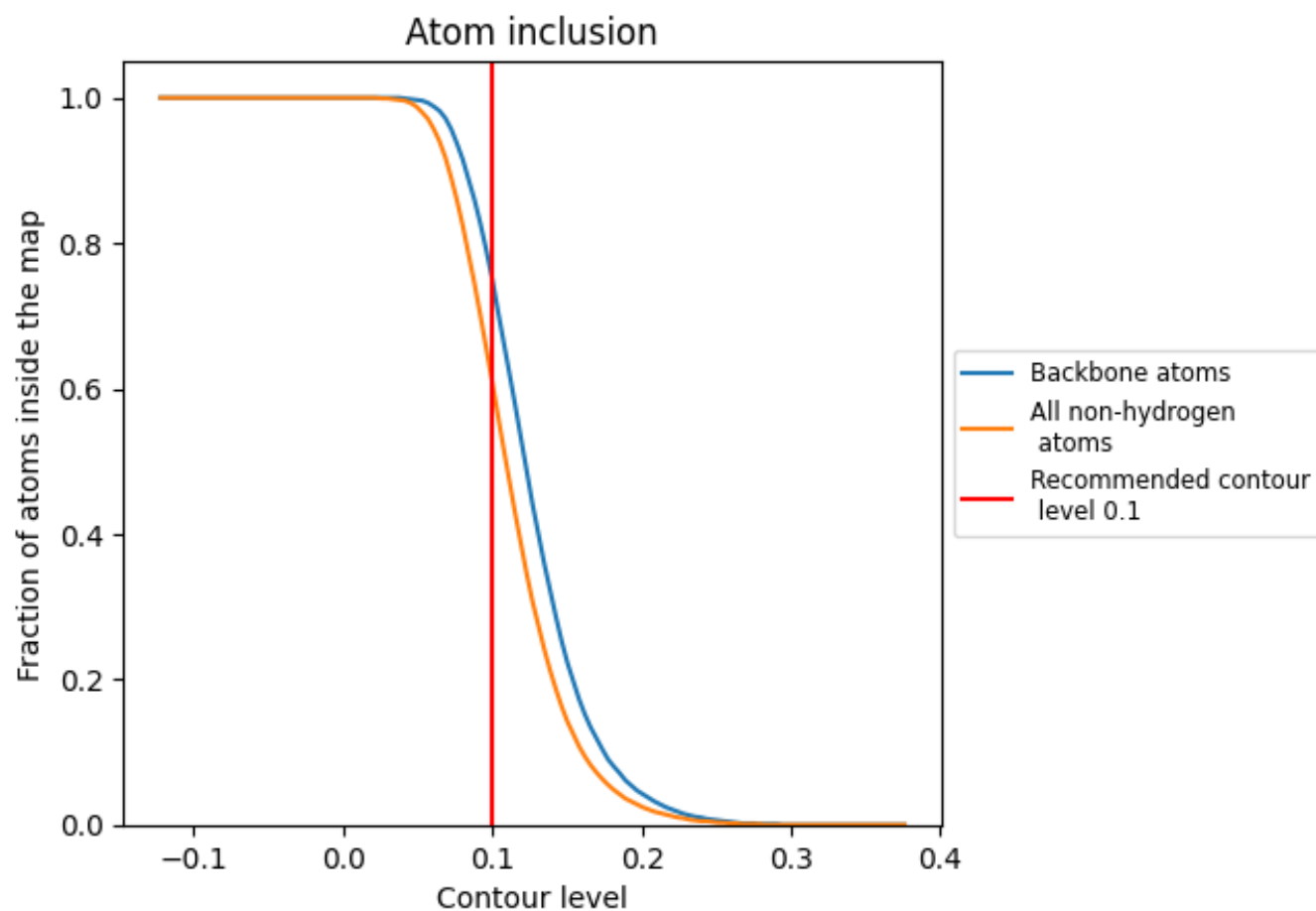
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions 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 (0.1).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 75% of all backbone atoms, 61% 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 (0.1) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.6080	0.1980
A	0.5500	0.1950
B	0.7640	0.2050
G	0.5000	0.3120
H	0.8240	0.2450
I	0.5950	0.0930
L	0.8130	0.2580
N	0.8820	0.2910
R	0.6770	0.2090

1.0

0.0

<0.0