



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 12:59 PM UTC

PDB ID : 9BDT / pdb_00009bdt
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:

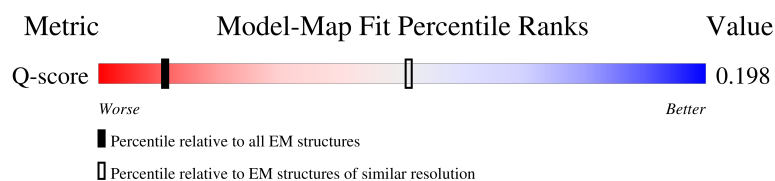
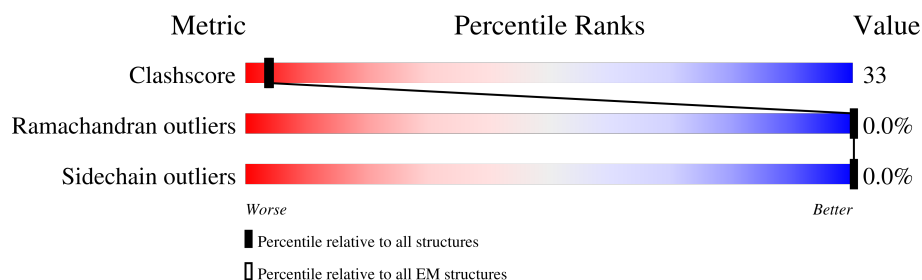
EMDB validation analysis : 0.0.1.dev132
Mogul : 2022.3.0, CSD as543be (2022)
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:
ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 5.40 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)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
Sidechain outliers	223484	23102	-
Q-score	-	25397	538 (4.90 - 5.90)

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	26% 32% 44% 24%
2	H	234	6% 34% 53% 13%
3	L	219	6% 48% 42% 10%
4	B	545	8% 39% 55% 6%

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
5	I	860	12%11%19%70%
5	R	860	8%18%14%68%
6	N	131	50%47%
7	G	2	50%50%

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.

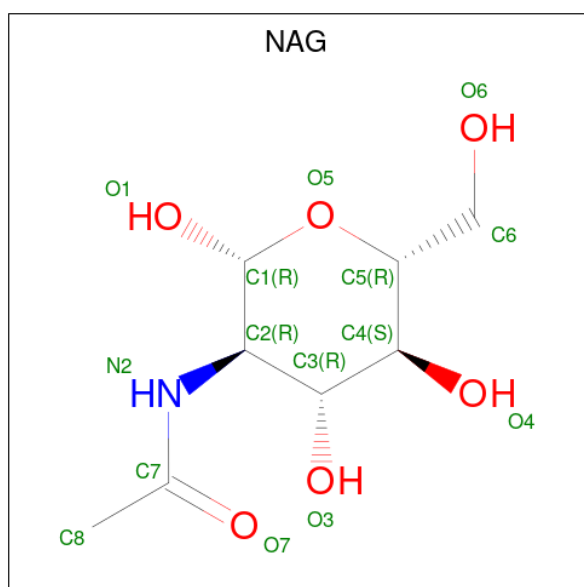
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
6	N	128	Total	C	N	O	S	0	0
			912	572	162	174	4		

- 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 (CCD ID: 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 (CCD ID: CA) (formula: Ca).

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

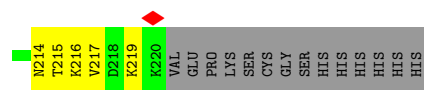


ALA	N2084	P2023	A1962	A1830	A1760	L1689	D1634	T1574	G1505	K1436	Y1373
LEU	R2085	ILE	A1963	Y1831	G1761	D1700	K1635	M1575	Q1506	F1437	S1374
THR	R2086	LYS	L1964	Q1832	L1762	K1702	I1636	G1576	R1507	S1438	G1375
LYS	T2087	VAL	E1965	N1833	S1763	L1703	M1637	K1577	D1508	H1439	G1376
ARG	I2088	PRO	H1966	M1834	L1764	A1704	G1638	Y1578	P1509	V1440	N1377
ILE	I2089	LEU	K1967	E1835	D1765	L1705	G1639	K1579	M1510	E1441	T1378
THR	V2090	LEU	V1968	H1938	F1766	T1706	A1640	M1580	L1511	K1442	S1379
GLU	V2091	SER	A1970	A1841	S1767	E1707	H1641	F1581	T1512	L1443	T1380
ASN	L2092	PRO	L1972	I1842	S1768	L1708	A1642	A1582	G1512	G1444	D1381
ASP	E2093	ILE	T1973	N1843	D1771	S1709	A1643	T1583	R1513	N1445	H1382
ASP	N2094	N2035	P1974	I1912	M1772	L1710	L1645	M1585	L1514	N1446	F1383
GLN	N2095	N2036	A1975	G1913	N1773	G1711	L1646	M1586	M1515	P1447	S1384
ILE	E2096	I2037	E1976	S1844	I1774	S1712	R1647	M1587	S1448	V1449	L1385
ALA	Q2096	ALA	Q1977	A1845	S1775	A1713	G1648	M1589	S1449	R1386	L1386
LEU	R2097	D2038	T1978	S1848	S1776	Y1714	Q1649	T1590	K1450	R1387	
ASP	N2098	A2039	G1979	A1849	D1777	G1715	D1650	F1591	G1451	R1388	
ASP	N2099	L2040	T1980	S1850	K1778	A1716	D1651	S1592	L1452	Y1389	
ALA	L2099	E2041	W1981	Y1851	F1779	I1717	I1652	K1593	L1453	H1390	
LYS	K2100	E2042	K1982	K1852	Y1780	L1718	S1653	Q1594	L1454	M1391	
ILE	H2101	N2042	L1983	A1853		L1719	S1654	M1595	D1455	K1392	
ASN	ASN	R2043	D1854	D1855	M1785	G1720	T1655	N1596	A1457	A1393	
PHE	ASN	D2044	T1855	T1856	L1786	V1721	T1656	T1530	S1458	D1394	
GLU	ILE	A2045	V1856	Q1927	Q1787	D1722	T1657	M1532	S1459	S1395	
LYS	GLN	V2046	F1987	N1927	L1788	S1723	T1658	I1533	Q1464	V1396	
LEU	PHE	V2046	N1988	Y1928	K1789	M1725	T1659	Y1537	M1465	L1398	
SER	E2047	E2047	M1989	Q1929	P1790	I1726	L1660	E1601	S1466	D1399	
GLN	N2048	N2048	M1990	K1930	Y1791	F1727	L1661	D1538	A1467	L1399	
ARG	P2049	P2049	F1931	A1935		N1728	C1662	E1538	S1468		
LYS	LYS	Q2050	L1932	F1864	S1792	K1729	S1663	G1540			
THR	THR	E2051	S1933	S1865	L1793	F1730	L1664	T1541			
ARG	ARG	F2052	K1934	H1866		M1732	L1665	L1542			
ALA	ALA	T2053	A1936	N1869	T1796	Q1733	L1666	L1542			
ILE	ILE	L2054	L1936	T1870	L1797	E1734	L1667	T1545			
GLY	GLY	V2055	D1937	D1871	N1798	E1735	L1668	T1546			
PHE	GLN	V2055	A1998	T1872	S1799	G1736	M1669	T1547			
ASP	ASP	A2056	Y1999	L1801	L1800	L1736		K1474			
LEU	LEU	F2057	F1940	K1802	K1802	K1737	L1672	K1475			
PRO	GLN	V2058	T1941	Y1803	Y1803	L1738	E1674	K1476			
GLN	ILE	K2059	F1942	N1804	N1804	S1739	L1675	Q1477			
LYS	ALA	Y2060	S1943	A1878	A1805		L1676	Q1477			
ASP	ASP		H1944	L1806	L1806		L1677	H1478			
SER	THR	N2063	D1945	D1807	D1807	M1742	G1676	H1479			
ASP	THR	Q2064	N1881	L1808	L1808	M1743	L1677	V1481			
LEU	LEU	D2065	S1882	T1809	T1809	G1744	L1678	K1482			
SER	SER	V2066	T1883	N1810	N1810	S1745	G1679	K1483			
PHE	PHE	H2067	N1884	M1811	M1811	Y1747	A1680	V1484			
ASN	ASN	S2068	Y1885	G1812	G1812	E1748	S1681	K1485			
LYS	TRP	S2068	S1951	K1813	K1813	M1749	M1682	L1420			
ILE	GLU	I2069	H1952	L1814	L1814	F1750	G1693	L1421			
ALA	ALA	N2070	H1953	R1815	R1815	D1751	L1624	S1421			
ASN	VAL	L2071	L1954	L1816	L1816	F1751	E1625	C1422			
SER	SER	F2072	V1955	E1817	E1817	H1753	N1687	D1423			
ILE	ILE	F2073	S1956	P1818	P1818	T1754	G1688	G1424			
ALA	ALA	F2074	R1957	L1819	L1819	M1755	R1689	S1425			
LYS	LYS	Q2075	K1958	L1819	L1819	S1756	H1693	K1429			
GLU	GLU	T2076	S1959	K1820	K1820	L1757	M1694	H1429			
LYS	LYS	T2077	I1960	L1827	L1827	N1758	N1697	G1501			
LEU	LEU	Q2078	S1961	K1828	K1828	I1759	F1697	T1500			
THR	THR	E2079		G1829	G1829			G1502			
		Y2080						S1503			
		F2081						L1504			
		E2082						S1504			
		R2083						I1435			

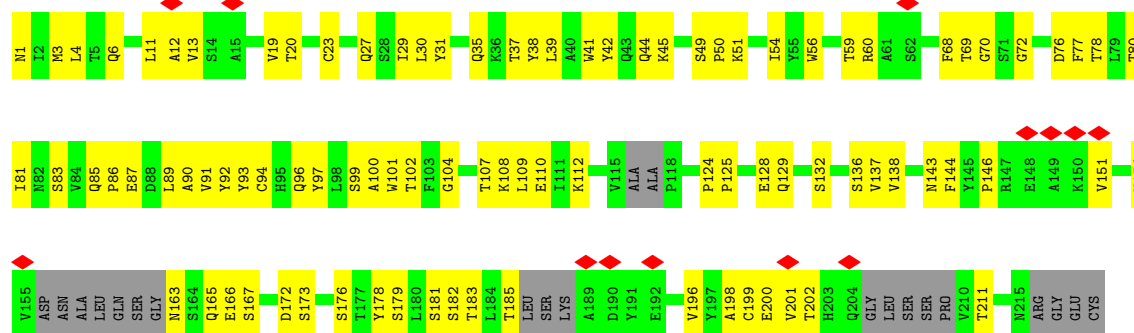


L3929	P3865	K3729	Q3802	P3865	A3598	V3530	F3460	A3398	T3329	A3269	E3209	LEU
V3930	K3868	F3730	P3803	K3868	V3600	K3531	K3461	L3399	A3333	F3270	K3210	PRO
T3933	F3869	I3731	E3804	F3869	Q3667	L3532	Y3462	S3400	A3333	G3271	R3212	THR
K3935	S3870	L3732	D3805	L3669	Q3601	Q3533	D3463	L3401	M3334	V3272	N3213	ILE
L3936	V3871	P3733	S3806	R3670	H3603	T3535	N3465	S3402	G3335	F3273	K3213	ILE
D3937	P3872	L3735	L3807	F3671	S3604	S3536	K3468	F3405	T3338	N3214	N3214	
L3938	A3873	L3736	P3809	L3672	S3605	W3542	L3469	V3406	V3339	P3275	K3216	
D3939	G3874	L3737	F3810	L3677	Q3606	N3543	S3471	E3407	D3340	K3276	L3216	
T3940	L3875	N3738	F3811	P3678	S3609	E3545	T3472	G3408	F3341	D3217	K3217	
L3941	V3876	D3739	L3812	V3679	H3611	V3546	A3473	S3409	S3342	V3278	F3218	
A3942	L3877	L3740	E3813	Y3680	Q3618	K3547	K3473	H3410	F3343	S3279	K3148	
S3943	P3878	L3741	T3814	D3681	H3611	E3548	K3474	N3411	S3344	M3280	D3149	
K3944	S3879	N3741	L3815	K3682	P3614	G3475	G3475	S3412	S3345	T3220	K3149	
T3945	F3880	S3742	P3816	S3683	D3615	N3549	A3476	T3413	S3346	P3281	S3151	
K3946	Q3881	V3743	E3817	L3684	L3616	F3550	H3479	V3414	V3347	K3221	S3152	
G3947	L3881	L3744	Q3819	V3685	G3617	E3553	K3480	S3415	L3348	S3222	L3152	
T3948	L3886	V3745	L3820	D3686	Q3618	A3554	L3481	L3416		Y3223	K3155	
F3949	P3887	M3746	F3809	F3687	E3619	T3555	L3481	T3417	N3351	N3224		
A3950	E3888	L3747	P3812	L3688	S3619	L3556	S3482	T3418	E3325	K3226	L3158	
H3951	R3888	P3747	K3851	K3689	A3621	Q3557	E3484	K3419	G3287	F3232	K3159	
K3952	V3889	T3748	F3825	L3690	L3622	R3558	S3485	T3429	S3288	K3227	E3160	
D3953	D3890	F3749	T3826	L3690	N3623	T3559	S3485	K3430	D3289	I3228		
	S3891	H3750	L3827	D3691	A3624	Y3560	T3486	K3430	V3290	K3229		
	F3892		P3828	V3692	N3625	S3561	T3487	V3425	S3350	K3229		
A3956	E3893		K3829	T3693	N3628	L3562	F3490	A3426	D3361	F3230		
E3957	Y3894	F3753	T3894	T3694	S3643	S3563	S3491	T3427	T3362	S3168		
E3959	N3895	T3754	S3830	S3695	Q3629	K3563	K3491	T3427	V3363	F3169		
E3960	A3896	D3755	V3831	L3696	K3630	E3564	I3492	T3428	A3364	D3170		
D3961	T3897	L3756	S3832	G3697	I3631	S3566	T3496	K3430	H3365	L3171		
K3962	K3898	Q3757	ASP	R3698	R3632	R3632	K3497	A3431	S3368	S3172		
K3963	S3899	K3762	ILE	R3699	W3633	N3569	G3497	Q3432	Y3295	K3234		
Y3964	A3900	L3763	ALA	Q3700	K3634	H3570	D3499	T3433	T3296	A3235		
L3967	L3901	D3764	ALA	H3701	V3637	L3571	V3500	F3434	L3297	E3236		
Q3968	L3902	F3765	R3703	L3702	R3638	Q3572	K3501	L3436	K3237	S3238		
E3969	K3903	E3766	D3839	R3703	L3638	L5773	V3504	R3437	S3239	F3237		
K3970	K3905	K3767	L3840	S3705	L3639	E3574	L3505	M3438	P3300	H3182		
E3971	V3908	Q3768	A3841	T3706	G3642	F3578	L3506	N3439	S3301	D3240		
G3972	V3909	Q3769	A3842	A3707	S3643	T3578	S3506	F3440	L3302	E3241		
H3975	E3910	L3770	V3843	F3708	Q3644	N3580	R3507	K3441	E3303	N3188		
L3976	T3911	Y3771	A3844	F3708	Q3645	G3581	E3508	Q3442	L3242	F3189		
N3977	V3912	K3772	N3845	V3709	S3646	E3582	Y3509	E3443	P3243	L3190		
	L3913	K3773	K3846	Y3710	Q3647	H3583	S3510	L3444	K3380	A3191		
	D3914	L3774	K3946	T3711	V3648	T3584	G3511	N3445	L3381	V3192		
	S3915		L3847	K3712	E3649	S3585	T3512	G3446	T3384	V3245		
T3984	T3916	S3778	A3848	N3715	L3650	K3586	I3513	N3447	T3386	F3246		
D3985	T3917	F3779	D3849	F3779	N3652	A3587	A3517	S3450	V3247	K3248		
L3986	C3917	A3780	L3852	A3780	D3653	T3588	N3518	K3451	PRO	L3193		
L3988	S3918		L3853	F3719	Q3654	E3590	T3519	P3452	ASN	C3194		
K3989	S3919		P3853	F3720	E3655	L3591	V3520	K3390	F3249	F3196		
L3990	T3920		L3854	S3719	K3656	L3592	L3521	R3391	G3250	E3195		
Q3991	V3921	L3783	T3854	F3721	E3656	S3592	K3521	G3392	L3197	L3197		
D3992	Q3922	P3784	T3854	I3721	L3659	P3593	N3522	S3455	LYS	Q3251		
L3993	F3923	T3785	L3855	T3785	D3660	W3594	S3523	L3393	LEU	S3199		
K3994	L3924	L3786	T3856	L3786	L3659	Q3595		L3394	SER	V3253		
	E3925		V3857		I3661	K3596	R3527	S3457	LEU	P3254		
	K3995	V3789	P3858	K3724	K3661	N3596	S3528	M3458	PRO	S3255		
G3996	E3927	K3790	E3859	L3725	V3726	S3597	S3529	E3459	ASP	V3256		
I3997	L3928	V3794	L3864	A3727	S3664				PHE	N3257		
		D3795		D3728					LYS	K3202		
		V3796							GLU	F3204		
		L3797							LEU	D3205		
		T3798							CYS	K3206		
									THR	V3260		
									ILE	S3261		
									S3327	P3262		
									H3328	F3263		
										T3264		
										I3265		
										E3266		
										M3267		
										S3268		

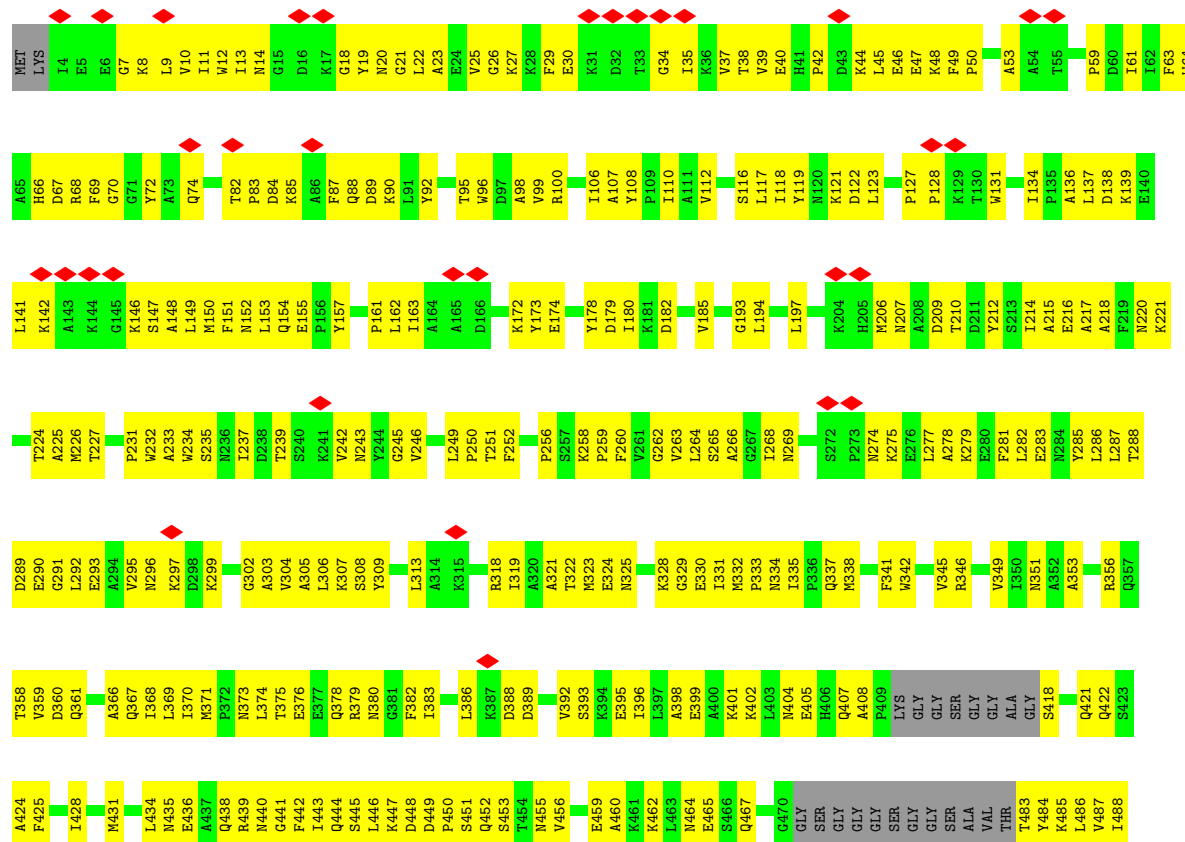


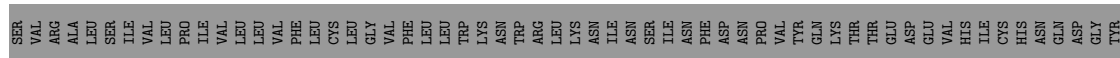


• Molecule 3: Legobody 8D3 Fab Light Chain

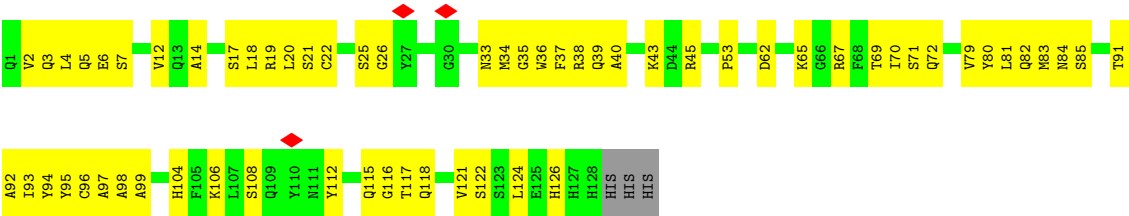


• Molecule 4: Maltodextrin-binding protein, Immunoglobulin G-binding protein A, Immunoglobulin G-binding protein G









● 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 [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

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	0.12	0/27687	0.33	1/37490 (0.0%)
2	H	0.17	0/1581	0.41	0/2155
3	L	0.11	0/1438	0.33	0/1973
4	B	0.12	0/4032	0.33	1/5473 (0.0%)
5	I	0.15	0/1969	0.39	0/2700
5	R	0.19	1/1944 (0.1%)	0.43	0/2637
6	N	0.13	0/930	0.37	0/1258
All	All	0.13	1/39581 (0.0%)	0.34	2/53686 (0.0%)

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
5	R	308	GLU	C-O	5.45	1.26	1.23

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
4	B	185	VAL	N-CA-C	-5.49	107.93	113.47
1	A	3101	ASN	N-CA-CB	5.29	119.57	110.68

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	27163	0	26925	1775	0
2	H	1540	0	1470	136	0
3	L	1410	0	1265	72	0
4	B	3948	0	3850	283	0
5	I	1925	0	1789	166	0
5	R	1910	0	1516	110	0
6	N	912	0	824	51	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	2548	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 (2548) 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:347:LEU:HD23	1:A:350:LYS:HZ3	1.45	0.81
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
4:B:150:MET:HE1	4:B:215:ALA:HA	1.65	0.79
2:H:113:TRP:HE1	3:L:49:SER:HB2	1.47	0.79
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
4:B:304:VAL:H	4:B:323:MET:HE1	1.51	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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: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
3:L:1:ASN:H1	3:L:100:ALA:HB3	1.55	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:564:MET:HE3	1:A:564:MET:O	1.93	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:51:LYS:HZ1	1:A:81:GLU:HB2	1.58	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:564:MET:HE1	1:A:567:ARG:HD3	1.77	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
1:A:566:MET:HE3	1:A:596:HIS:HB3	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:1916:LYS:HZ2	1:A:1925:GLY:H	1.44	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
1:A:4089:HIS:O	1:A:4093:THR:OG1	2.16	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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: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:172:ASP:O	3:L:176:SER:N	2.31	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:695:LYS:HZ2	1:A:772:GLU:HG2	1.66	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:H:153:LYS:NZ	2:H:154:ASP:OD1	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:584:GLU:O	1:A:590:LYS:NZ	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
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:3415:SER:H	1:A:3421:MET:HE2	1.66	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
4:B:212:TYR:HH	4:B:232:TRP:CD1	2.20	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:191:THR:OG1	1:A:204:SER:O	2.19	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
6:N:20:LEU:HD11	6:N:83:MET:HE2	1.84	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
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:2843:MET:HE1	1:A:2845:PHE:HB2	1.83	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
4:B:151:PHE:H	4:B:206:MET:HE1	1.67	0.58
1:A:497:GLN:H	1:A:533:LYS:NZ	2.01	0.58
1:A:1159:SER:OG	1:A:1185:ASP:OD1	2.18	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:399:LYS:HZ1	1:A:432:MET:HB2	1.68	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:4082:TYR:HH	1:A:4097:LEU:H	1.53	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:1511:THR:O	1:A:1513:ARG:NH1	2.38	0.56
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
4:B:100:ARG:O	4:B:173:TYR:OH	2.22	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:1399:LEU:O	1:A:1428:HIS:NE2	2.38	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1759:ILE:HD13	1:A:1764:LEU:HA	1.87	0.56
4:B:136:ALA:O	4:B:139:LYS:NZ	2.38	0.56
4:B:293:GLU:HB2	4:B:297:LYS:HZ3	1.70	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
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: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
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:522:MET:HE1	1:A:774:ARG:HD3	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:992:TYR:O	1:A:996:THR:OG1	2.23	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
1:A:3276:LYS:HZ2	1:A:3300:PRO:HA	1.72	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
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:3390:LYS:NZ	5:R:221:ASP:O	2.35	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:2931:TRP:NE1	1:A:2933:CYS:SG	2.81	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: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:46:GLU:O	4:B:72:TYR:OH	2.16	0.54
4:B:341:PHE:HD1	4:B:370:ILE:HG12	1.73	0.54
4:B:428:ILE:HA	4:B:431:MET:HE1	1.89	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:846:LEU:HD12	1:A:887:MET:HE1	1.90	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
3:L:45:LYS:H	3:L:51:LYS:HZ1	1.55	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:2889:TYR:OH	1:A:2891:HIS:ND1	2.41	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
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: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
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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
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:525:LYS:HZ1	1:A:557:LYS:H	1.55	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
2:H:29:PHE:HE1	2:H:34:MET:HE2	1.75	0.52
4:B:335:ILE:HB	4:B:338:MET:HE1	1.92	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:3143:THR:OG1	1:A:3144:THR:N	2.43	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:2799:SER:OG	1:A:2801:LEU:O	2.27	0.51
1:A:2884:ASP:HA	1:A:2911:LYS:HA	1.93	0.51
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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:1818:PRO:O	1:A:1820:LYS:NZ	2.37	0.51
1:A:1947:LYS:NZ	1:A:1966:HIS:O	2.43	0.51
1:A:2437:ASP:OD1	1:A:2437:ASP:N	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:OD1	1:A:69:ASP:N	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
5:R:346:LEU:HB2	5:R:354:ASP:C	2.36	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
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
2:H:207:ASN:HB3	2:H:216:LYS:HZ1	1.77	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:3682:LYS:NZ	1:A:4092:HIS:O	2.39	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:1914:ASN:HB2	1:A:1916:LYS:HZ1	1.77	0.50
1:A:1980:THR:OG1	1:A:1997:ASP:OD1	2.22	0.50
1:A:3913:LEU:O	1:A:3930:VAL:N	2.25	0.50
4:B:89:ASP:O	4:B:307:LYS:NZ	2.36	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
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: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:HB2	5:I:531:MET:HE2	1.94	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:3548:GLU:CD	1:A:3565:HIS:HD1	2.20	0.49
1:A:3558:ARG:HB2	1:A:3591:LEU:C	2.37	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:3898:TRP:NE1	1:A:3915:SER:OG	2.45	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: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
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
5:I:403:PHE:HA	5:I:652:MET:HE1	1.95	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:I:520:ARG:HH11	5:I:520:ARG:C	2.20	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:273:LYS:HZ2	1:A:275:LYS:HB3	1.78	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
2:H:29:PHE:CE1	2:H:34:MET:HE2	2.47	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
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
2:H:5:VAL:O	2:H:23:ALA:N	2.45	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
5:I:432:LEU:C	5:I:522:ILE:HD11	2.37	0.48
5:I:449:ARG:O	5:I:450:MET:HE2	2.13	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:405:GLU:CD	4:B:405:GLU:H	2.22	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:1021:GLU:OE1	1:A:1032:THR:OG1	2.30	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: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:51:LYS:NZ	1:A:81:GLU:HB2	2.28	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
5:I:638:ASP:OD2	5:I:640:ASN:ND2	2.44	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:35:GLY:C	6:N:97:ALA:H	2.16	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:2808:PHE:HB2	1:A:2830:PHE:HD1	1.78	0.48
1:A:3415:SER:OG	1:A:3416:LEU:N	2.46	0.48
2:H:113:TRP:NE1	3:L:49:SER:HB2	2.22	0.48
3:L:13:VAL:C	3:L:112:LYS:HZ2	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: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:802:GLY:O	1:A:805:THR:OG1	2.29	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:3656:LYS:NZ	1:A:3710:TYR:O	2.37	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:798:LEU:HA	1:A:801:MET:HE2	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
3:L:54:ILE:HG13	3:L:59:THR:C	2.39	0.47
1:A:175:GLN:NE2	1:A:177:LEU:HB2	2.30	0.47
1:A:387:GLN:HB3	1:A:389:GLN:CD	2.39	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:1035:PHE:HB2	1:A:1049:MET:HE3	1.97	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
1:A:1417:THR:HA	1:A:1444:GLY:HA2	1.96	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:85:LYS:O	4:B:85:LYS:NZ	2.42	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:709:GLY:O	1:A:760:LYS:NZ	2.39	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:R:300:ARG:HH12	5:R:305:TRP:HB2	1.79	0.47
1:A:525:LYS:HZ3	1:A:556:ASP:HB3	1.80	0.47
1:A:629:ASP:CG	1:A:631:ARG:HE	2.22	0.47
1:A:1030:VAL:HG12	1:A:1054:ASN:HB2	1.97	0.47
1:A:1153:SER:HB3	1:A:1160:THR:HG1	1.79	0.47
1:A:1630:ILE:O	1:A:1642:LYS:NZ	2.43	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2461:GLN:HA	1:A:2464:GLU:HG3	1.97	0.47
1:A:3244:ARG:HB3	1:A:3267:MET:HE2	1.97	0.47
1:A:3527:ARG:NH2	5:R:310:ILE:HG12	2.30	0.47
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
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:1488:GLY:C	1:A:1499:GLY:H	2.23	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:566:MET:HE1	1:A:597:ILE:HD13	1.97	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:H:20:LEU:HD11	2:H:83:MET:HG2	1.97	0.46
2:H:74:ASN:HD22	2:H:74:ASN:C	2.23	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
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
3:L:69:THR:OG1	3:L:80:THR:O	2.27	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:64:VAL:HG13	1:A:277:GLY:C	2.41	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:3710:TYR:HD1	1:A:3712:LYS:HZ1	1.63	0.46
1:A:3750:HIS:HB2	1:A:3757:GLN:HB2	1.96	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:896:ARG:H	1:A:947:THR:HG1	1.62	0.46
1:A:2824:LEU:HD22	1:A:2843:MET:HB3	1.98	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
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
5:I:530:PHE:HA	5:I:545:GLY:C	2.41	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
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:67:ARG:HD2	4:B:462:LYS:HZ1	1.82	0.45
2:H:70:ILE:HD13	2:H:81:LEU:HD13	1.98	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:84:VAL:HG23	1:A:89:SER:C	2.42	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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: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
1:A:3560:TYR:OH	5:R:310:ILE:O	2.34	0.45
2:H:86:LEU:HB3	2:H:121:VAL:HG11	1.97	0.45
2:H:153:LYS:HG3	2:H:154:ASP:CG	2.41	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:409:ASP:CG	1:A:436:GLN:HG3	2.42	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:3750:HIS:HA	1:A:3757:GLN:HA	1.99	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:1897:ARG:NH1	1:A:2730:ASP:O	2.50	0.45
1:A:1905:MET:HE2	1:A:1935:ALA:O	2.17	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: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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
1:A:4017:ASP:OD1	1:A:4017:ASP:N	2.50	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
4:B:483:THR:HG1	4:B:484:TYR:H	1.63	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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: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:536:PRO:HG3	1:A:564:MET:HE2	1.99	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:2431:ASP:CG	1:A:2433:HIS:HD1	2.26	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: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
3:L:44:GLN:C	3:L:90:ALA:HB1	2.43	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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
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: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:1725:ASN:HB3	1:A:1742:MET:HE1	2.00	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:3107:ASN:C	1:A:3109:ASN:H	2.26	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
1:A:4061:GLU:H	1:A:4061:GLU:CD	2.26	0.43
2:H:34:MET:HE3	2:H:72:ARG:HD2	1.99	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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:1791:TYR:OH	1:A:2715:GLU:O	2.34	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:3937:GLU:O	1:A:3940:THR:OG1	2.30	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:1096:ILE:H	1:A:1108:GLY:C	2.26	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:1934:LYS:NZ	1:A:2734:PRO:O	2.50	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
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
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: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: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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
4:B:441:GLY:O	4:B:445:SER:OG	2.31	0.43
5:I:423:ILE:HG13	5:I:423:ILE:O	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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: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:I:578:VAL:HG23	5:I:584:SER:C	2.44	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:1689:ARG:O	1:A:1694:ASN:ND2	2.50	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
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:3206:ARG:HH22	1:A:3832:SER:C	2.28	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:1973:THR:OG1	1:A:1976:GLU:OE1	2.32	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:3431:ALA:O	1:A:3438:MET:HE3	2.20	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:21:GLY:C	4:B:295:VAL:HG12	2.44	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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
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: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
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:1160:THR:O	1:A:1182:THR:OG1	2.38	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
1:A:3958:TYR:OH	1:A:3960:GLU:OE1	2.22	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: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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2726:LEU:HD12	1:A:2726:LEU:HA	1.86	0.42
1:A:2990:SER:N	1:A:3002:LEU:O	2.44	0.42
1:A:3557:GLN:HB3	1:A:3593:PRO:HD3	2.01	0.42
2:H:69:THR:O	2:H:81:LEU:HD12	2.20	0.42
3:L:50:PRO:C	3:L:51:LYS:HD3	2.44	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: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:3933:THR:HG1	1:A:3944:LYS:HB2	1.85	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
3:L:27:GLN:CD	6:N:118:GLN:HG2	2.45	0.41
4:B:151:PHE:N	4:B:206:MET:HE1	2.34	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:3673:LYS:HZ1	1:A:3696:ILE:CG1	2.33	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
3:L:86:PRO:O	3:L:173:SER:OG	2.33	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
5:I:616:ASP:C	5:I:633:ARG:H	2.27	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
1:A:3505:LEU:O	1:A:3507:ARG:NE	2.54	0.41
1:A:3687:PHE:O	1:A:3689:LYS:NZ	2.50	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
3:L:129:GLN:O	3:L:132:SER:OG	2.38	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
5:R:284:CYS:HB3	5:R:287:GLY:C	2.45	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:3545:GLU:O	1:A:3547:LYS:NZ	2.54	0.41
1:A:4117:GLN:O	1:A:4121:ARG:HG2	2.20	0.41
5:I:555:LEU:HD11	5:I:590:VAL:O	2.20	0.41
5:I:648:SER:O	5:I:648:SER:OG	2.32	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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:3893:VAL:O	1:A:3919:SER:OG	2.27	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: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
4:B:333:PRO:HB2	4:B:338:MET:HE3	2.03	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:570:LEU:C	5:I:572:SER:H	2.29	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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:2937:SER:O	1:A:2937:SER:OG	2.33	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: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
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: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
1:A:54:TYR:CE2	1:A:256:VAL:HB	2.56	0.41
1:A:314:LYS:NZ	1:A:315:SER:O	2.45	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:2042:MET:HE3	1:A:2044:ASP:HB3	2.03	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:3969:GLU:H	1:A:3969:GLU:CD	2.27	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:H:61:GLY:O	2:H:65:LYS:N	2.54	0.41
2:H:104:GLY:C	6:N:126:HIS:HB3	2.46	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
1:A:649:ASP:OD1	1:A:649:ASP:N	2.52	0.41
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:545:LEU:HD21	1:A:576:LYS:HZ2	1.86	0.40
1:A:809:ILE:HA	1:A:812:MET:HE2	2.03	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:1838:HIS:HD1	1:A:1854:ASP:C	2.29	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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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
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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
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: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: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:528:ILE:HG21	1:A:560:ALA:C	2.47	0.40
1:A:544:LEU:HD22	1:A:565:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:847:GLN:HE21	1:A:888:GLY:HA3	1.86	0.40
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:3097:LYS:HZ3	1:A:3099:ASN:HB2	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 [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	3450/4563 (76%)	3221 (93%)	229 (7%)	0	100	100
2	H	197/234 (84%)	182 (92%)	15 (8%)	0	100	100

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
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	67
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%)	3013 (100%)	0	100	100
2	H	169/199 (85%)	169 (100%)	0	100	100
3	L	145/192 (76%)	145 (100%)	0	100	100
4	B	408/433 (94%)	408 (100%)	0	100	100
5	I	201/755 (27%)	201 (100%)	0	100	100
5	R	204/755 (27%)	204 (100%)	0	100	100
6	N	80/103 (78%)	79 (99%)	1 (1%)	61	72
All	All	4220/6517 (65%)	4219 (100%)	1 (0%)	100	100

All (1) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
6	N	53	PRO

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (61)

such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	155	ASN
1	A	175	GLN
1	A	243	GLN
1	A	340	GLN
1	A	343	GLN
1	A	346	ASN
1	A	349	ASN
1	A	380	GLN
1	A	541	GLN
1	A	636	ASN
1	A	708	GLN
1	A	828	HIS
1	A	870	GLN
1	A	886	ASN
1	A	904	ASN
1	A	907	HIS
1	A	943	HIS
1	A	959	ASN
1	A	1023	GLN
1	A	1098	ASN
1	A	1361	ASN
1	A	1464	GLN
1	A	1489	GLN
1	A	1515	ASN
1	A	1693	HIS
1	A	1728	ASN
1	A	1944	HIS
1	A	1994	GLN
1	A	2064	GLN
1	A	2070	ASN
1	A	2084	ASN
1	A	2094	ASN
1	A	2098	ASN
1	A	2732	GLN
1	A	2865	ASN
1	A	2989	GLN
1	A	2996	HIS
1	A	3224	ASN
1	A	3618	GLN
1	A	3782	ASN
1	A	4111	ASN
1	A	4142	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4149	GLN
1	A	4474	GLN
1	A	4493	GLN
1	A	4527	ASN
2	H	31	ASN
2	H	35	HIS
2	H	39	GLN
2	H	82	GLN
4	B	66	HIS
4	B	207	ASN
4	B	296	ASN
4	B	404	ASN
4	B	407	GLN
4	B	438	GLN
4	B	516	ASN
4	B	518	ASN
5	I	425	ASN
6	N	115	GLN
5	R	92	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

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	7,1	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	7,1	-	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
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

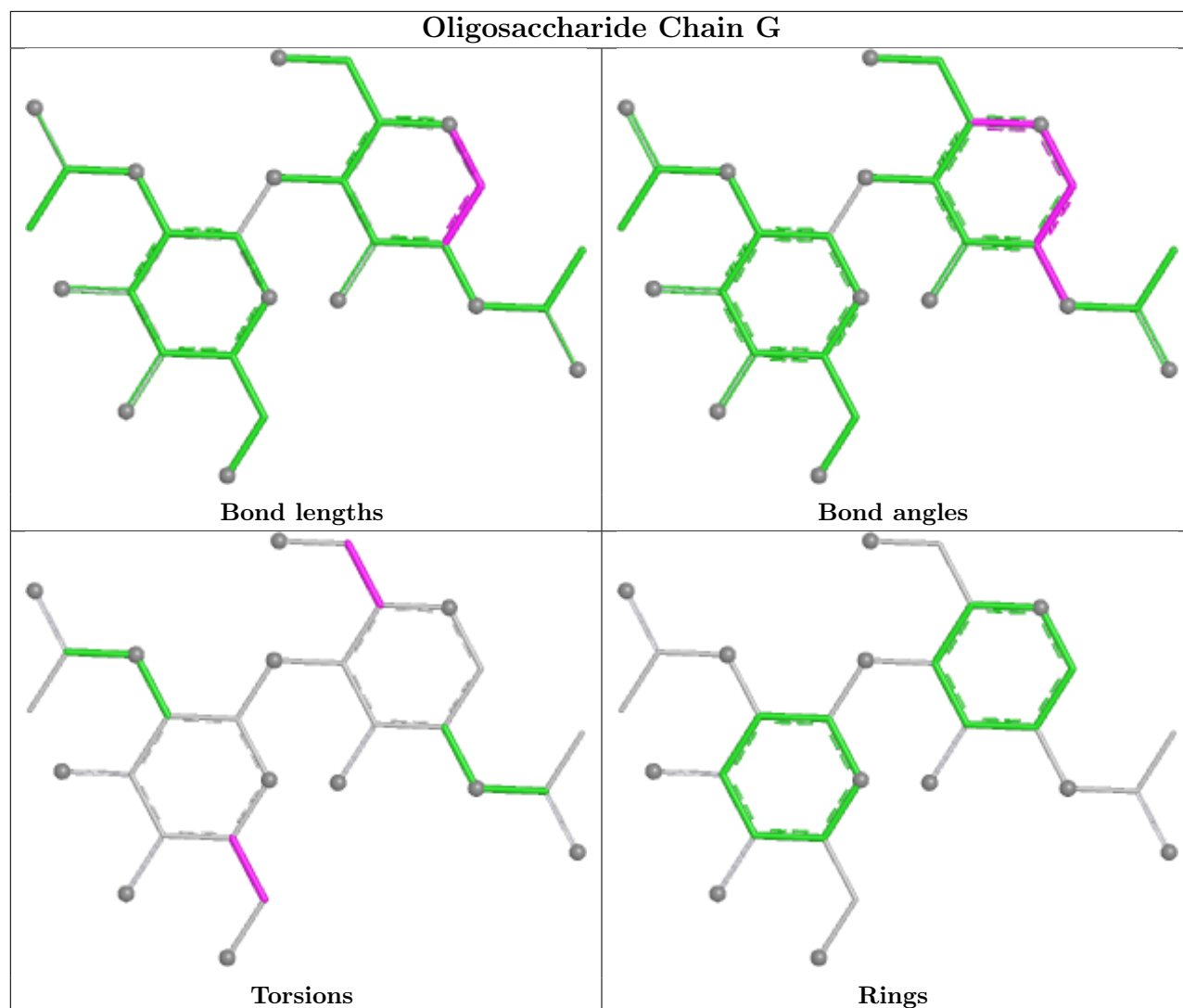
There are no ring outliers.

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	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%)
8	NAG	A	4603	1	14,14,15	0.24	0	17,19,21	0.47	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
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
8	NAG	A	4603	1	-	4/6/23/26	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.

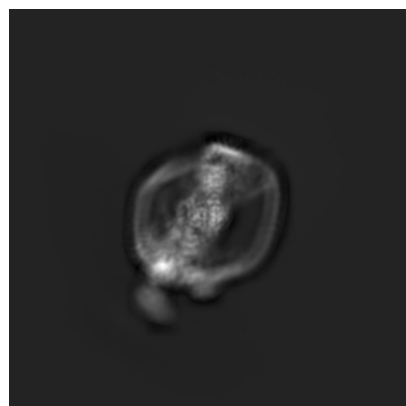
6 Map visualisation [i](#)

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.

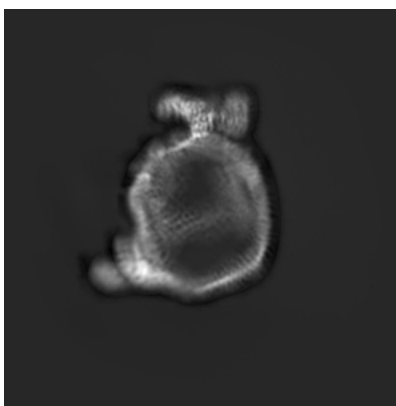
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

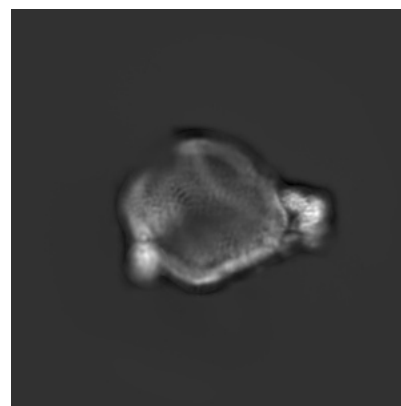
6.1.1 Primary map



X

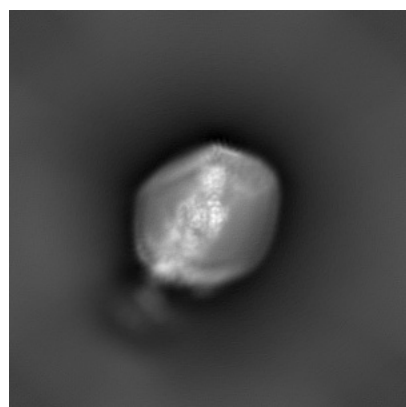


Y

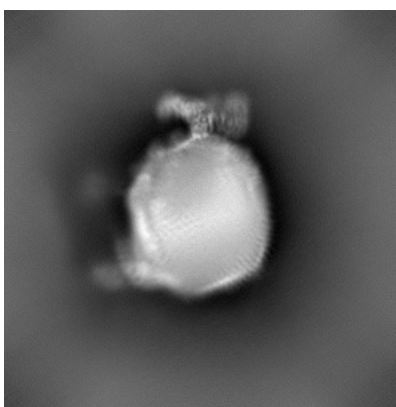


Z

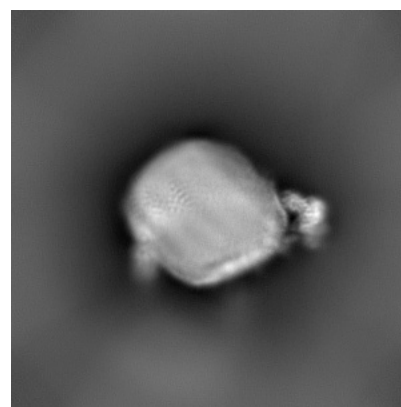
6.1.2 Raw map



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

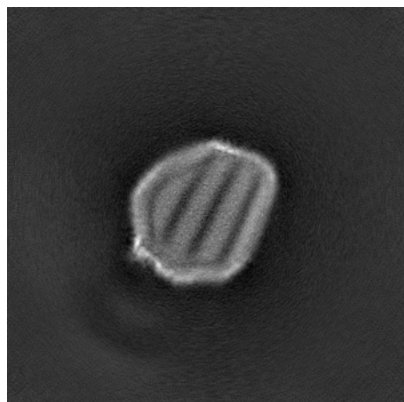


Y Index: 168

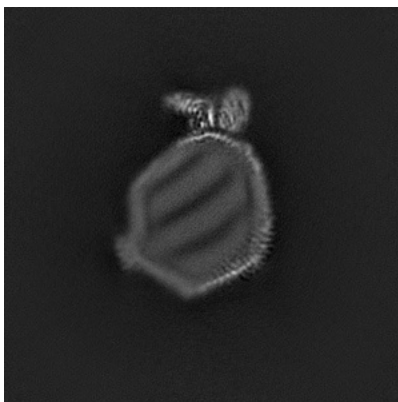


Z Index: 168

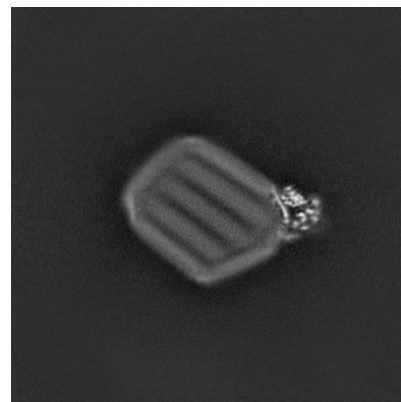
6.2.2 Raw map



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](#)

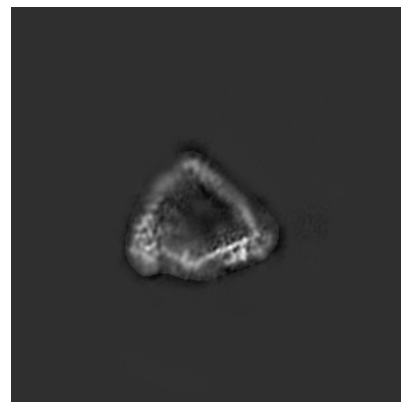
6.3.1 Primary map



X Index: 112

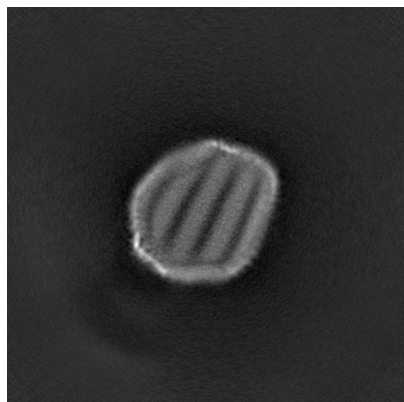


Y Index: 171

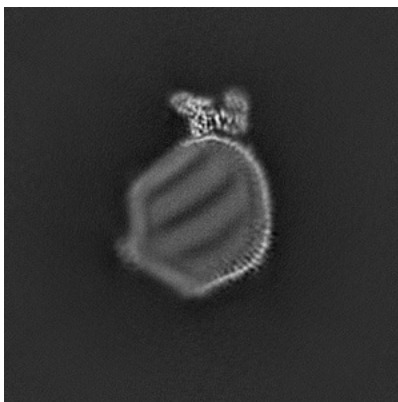


Z Index: 120

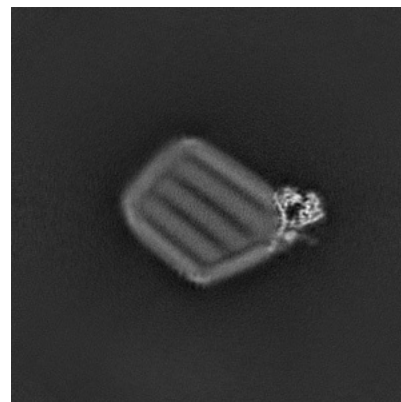
6.3.2 Raw map



X Index: 164



Y Index: 172

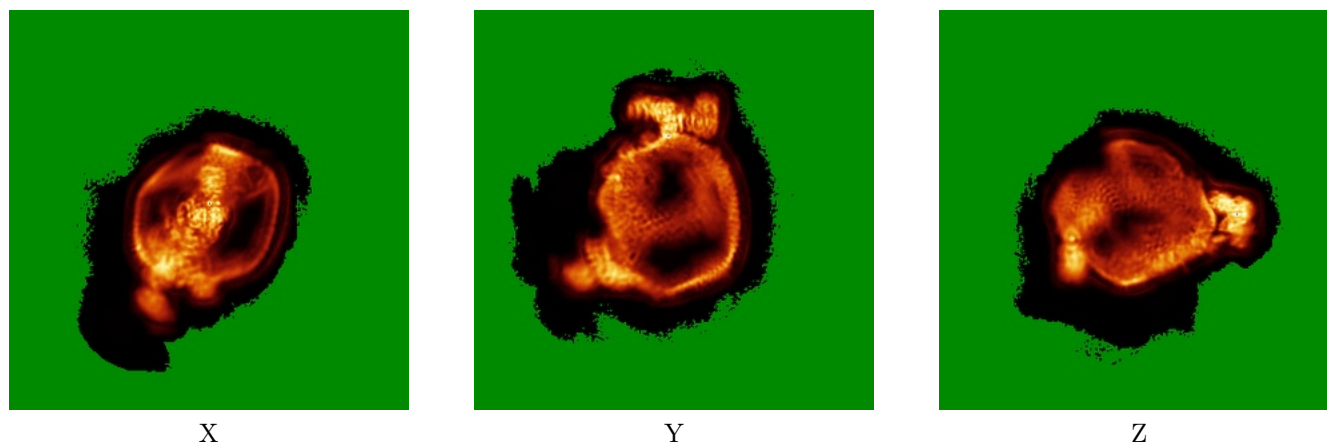


Z Index: 160

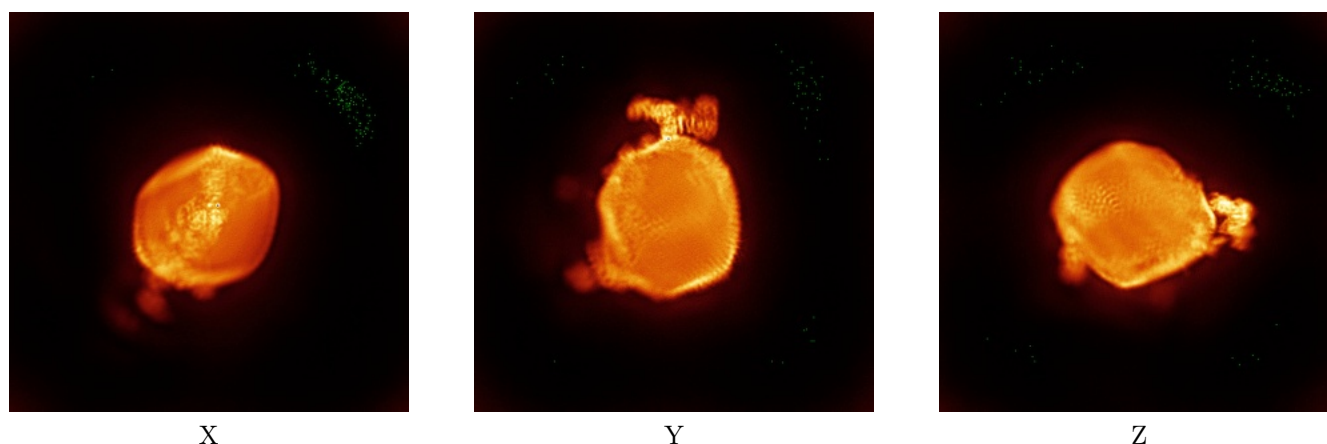
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

6.4.1 Primary map



6.4.2 Raw map



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

6.5 Orthogonal surface views [i](#)

This section was not generated.

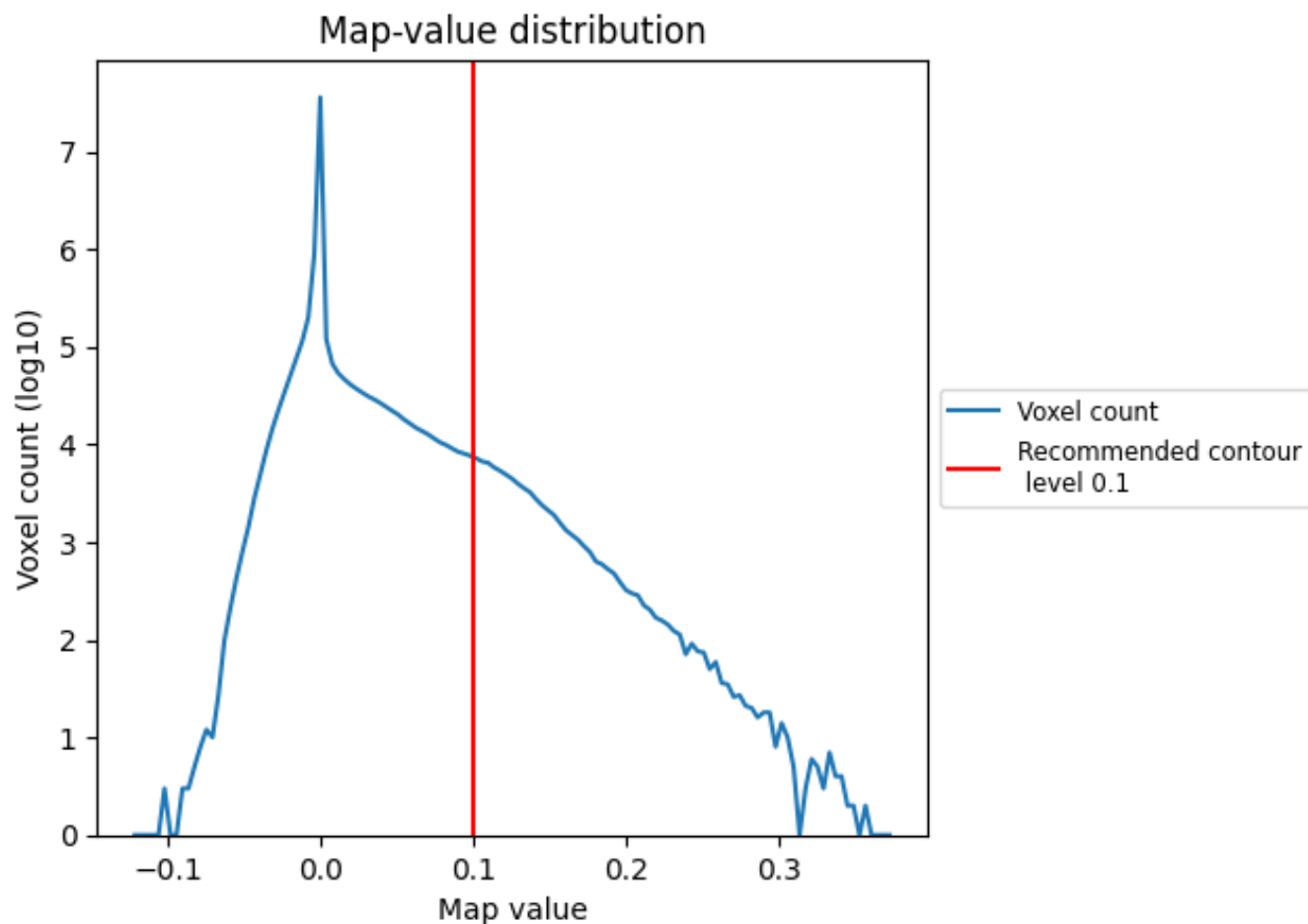
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

7 Map analysis [i](#)

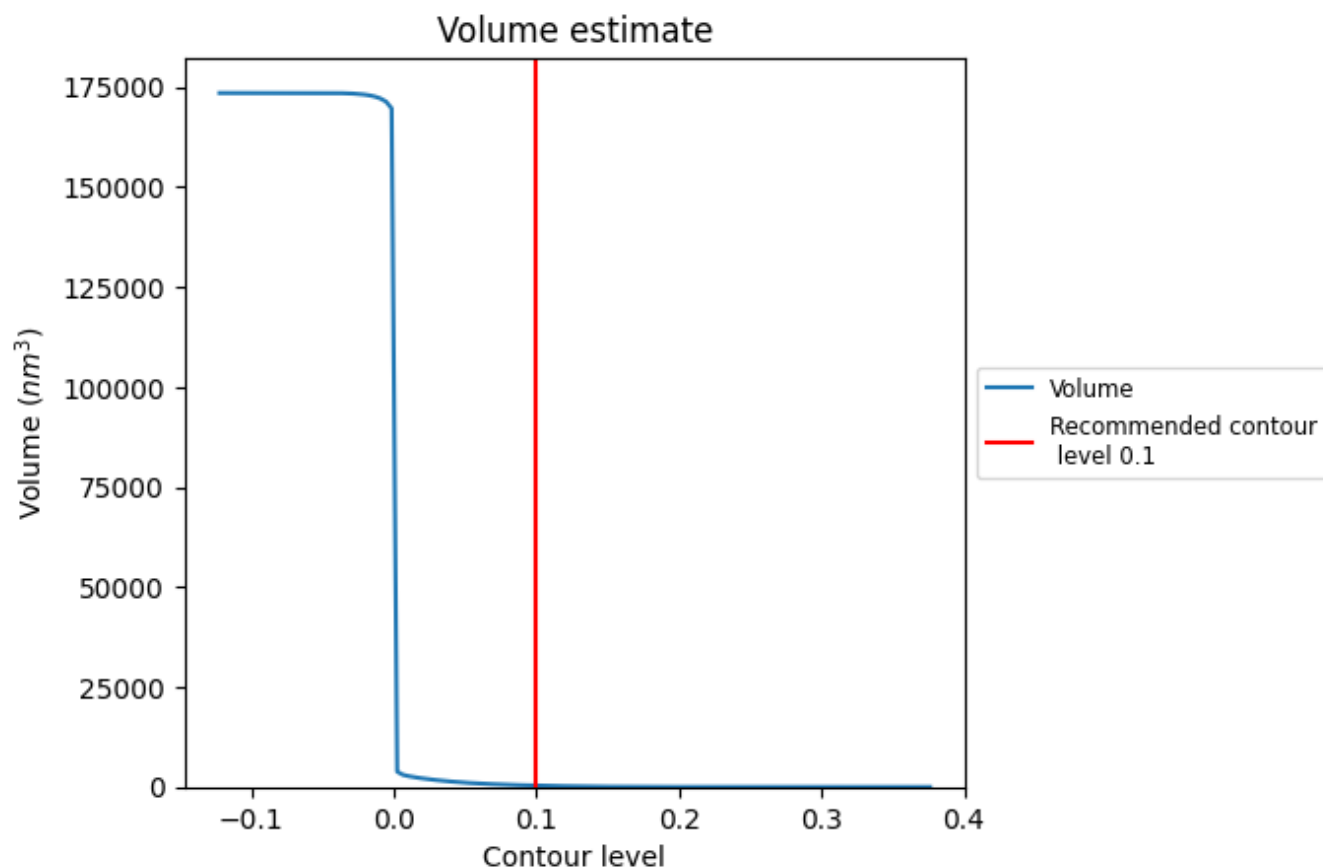
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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.

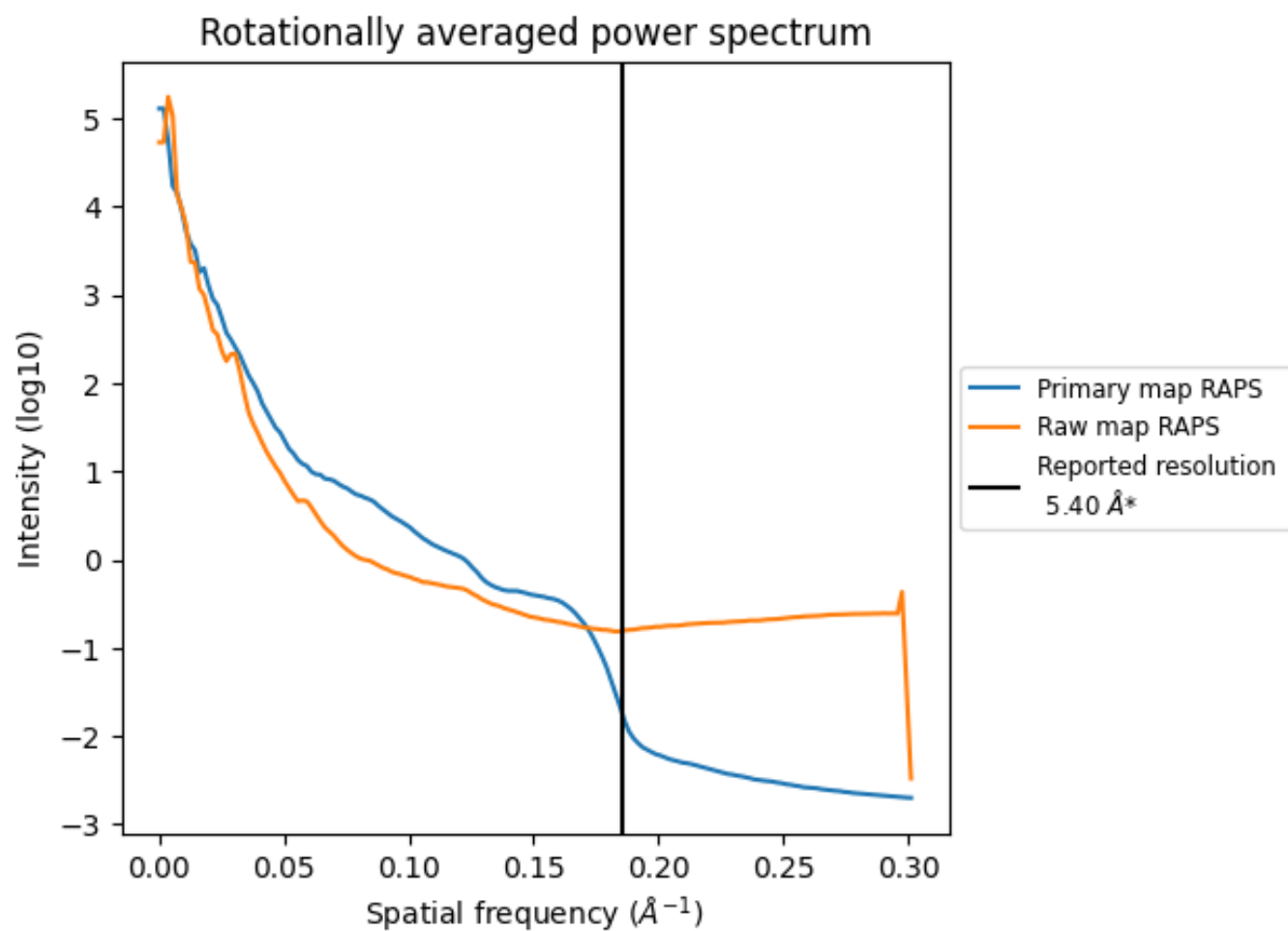
7.2 Volume estimate [i](#)



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 ⓘ

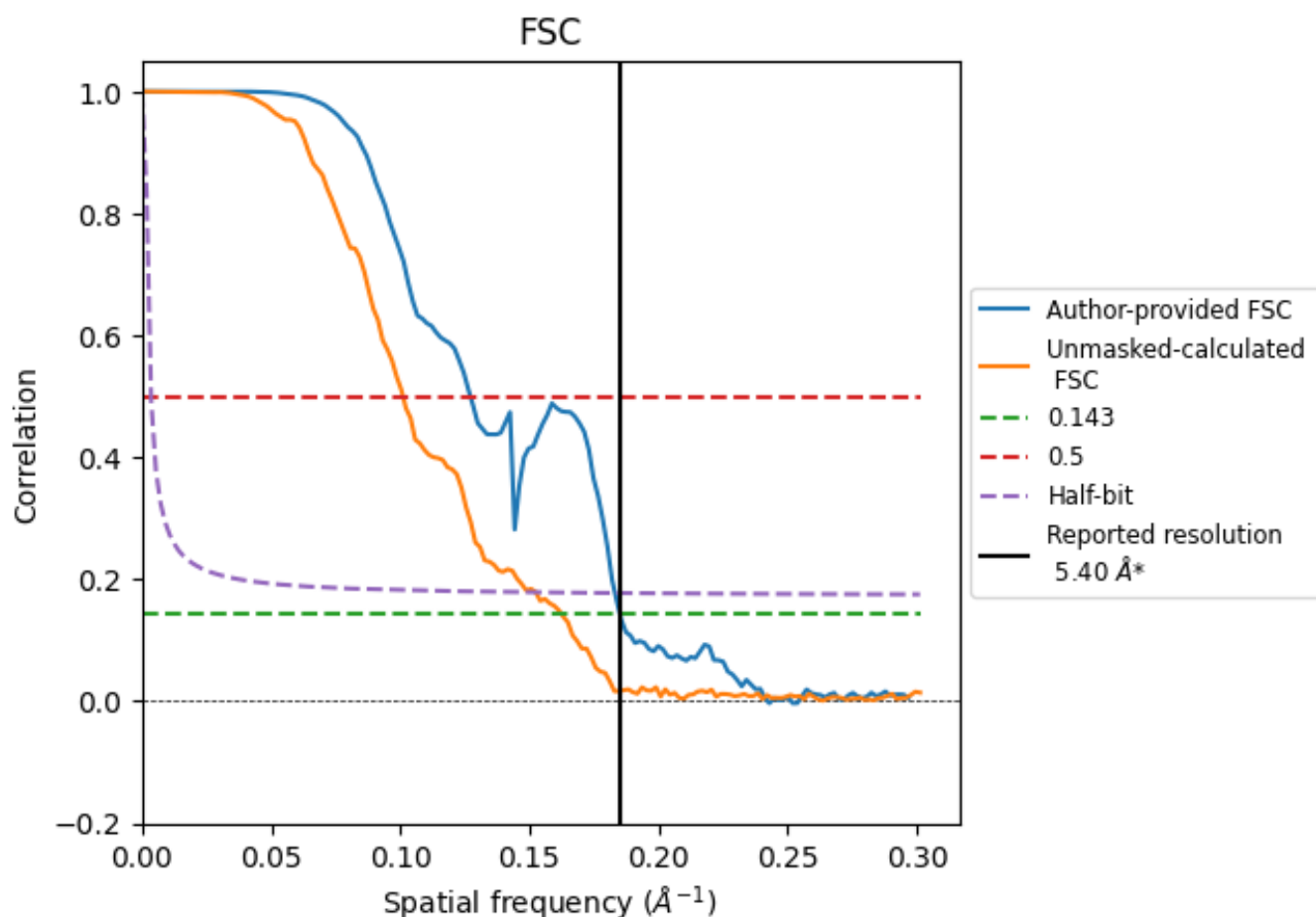


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.185 $\text{\AA}^{-1}$

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](#)

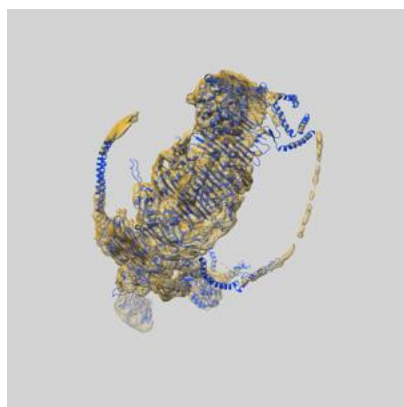
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	5.40	-	-
Author-provided FSC curve	5.41	7.87	5.46
Unmasked-calculated*	6.16	9.90	6.56

*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 %

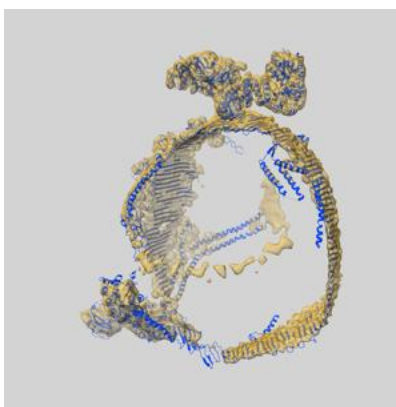
9 Map-model fit [i](#)

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 [8](#).

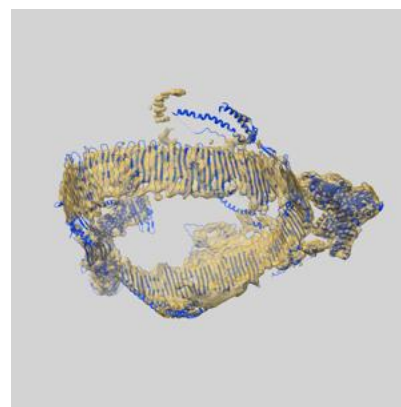
9.1 Map-model overlay [i](#)



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](#)

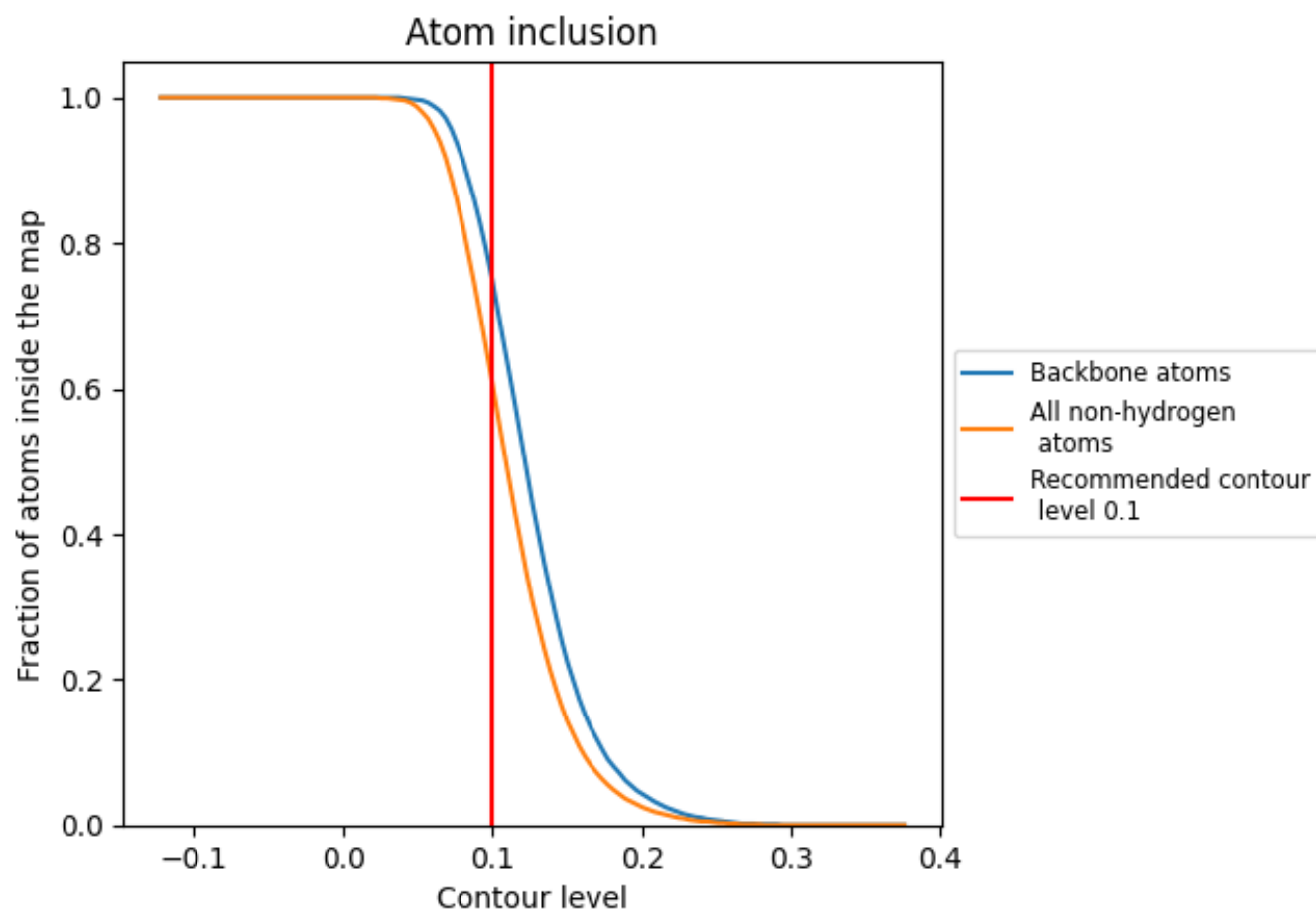


The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

This section was not generated.

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

