



# Full wwPDB/EMDatabank EM Map/Model Validation Report ⓘ

Feb 22, 2017 – 11:44 AM EST

PDB ID : 5H64  
EMDB ID: : EMD-6668  
Title : Cryo-EM structure of mTORC1  
Authors : Yang, H.; Wang, J.; Liu, M.; Chen, X.; Huang, M.; Tan, D.; Dong, M.; Wong, C.C.L.; Wang, J.; Xu, Y.; Wang, H.  
Deposited on : 2016-11-10  
Resolution : 4.40 Å(reported)

This is a Full wwPDB/EMDatabank EM Map/Model Validation Report  
for a publicly released PDB/EMDB entry.

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto:validation@mail.wwpdb.org)  
A user guide is available at  
<http://wwpdb.org/validation/2016/EMValidationReportHelp>  
with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

---

MolProbity : 4.02b-467  
Mogul : unknown  
Percentile statistics : 20151230.v01 (using entries in the PDB archive December 30th 2015)  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et. al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : rb-20028442

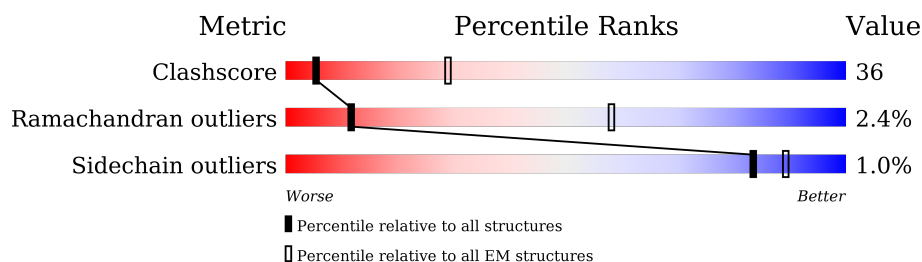
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 4.40 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	114402	924
Ramachandran outliers	111179	726
Sidechain outliers	111093	686

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains. The red, orange, yellow and green segments on the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for  $\geq 3$ , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. 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  $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	2549	
1	a	2549	
2	B	1335	
2	b	1335	
3	C	326	
3	c	326	

## 2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 45252 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 Serine/threonine-protein kinase mTOR.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	2101	Total	C	N	O	S	0	0
			15617	9886	2788	2849	94		
1	a	2101	Total	C	N	O	S	0	0
			15617	9886	2788	2849	94		

- Molecule 2 is a protein called Regulatory-associated protein of mTOR.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	B	797	Total	C	N	O	S	0	0
			4553	2817	832	894	10		
2	b	797	Total	C	N	O	S	0	0
			4553	2817	832	894	10		

- Molecule 3 is a protein called Target of rapamycin complex subunit LST8.

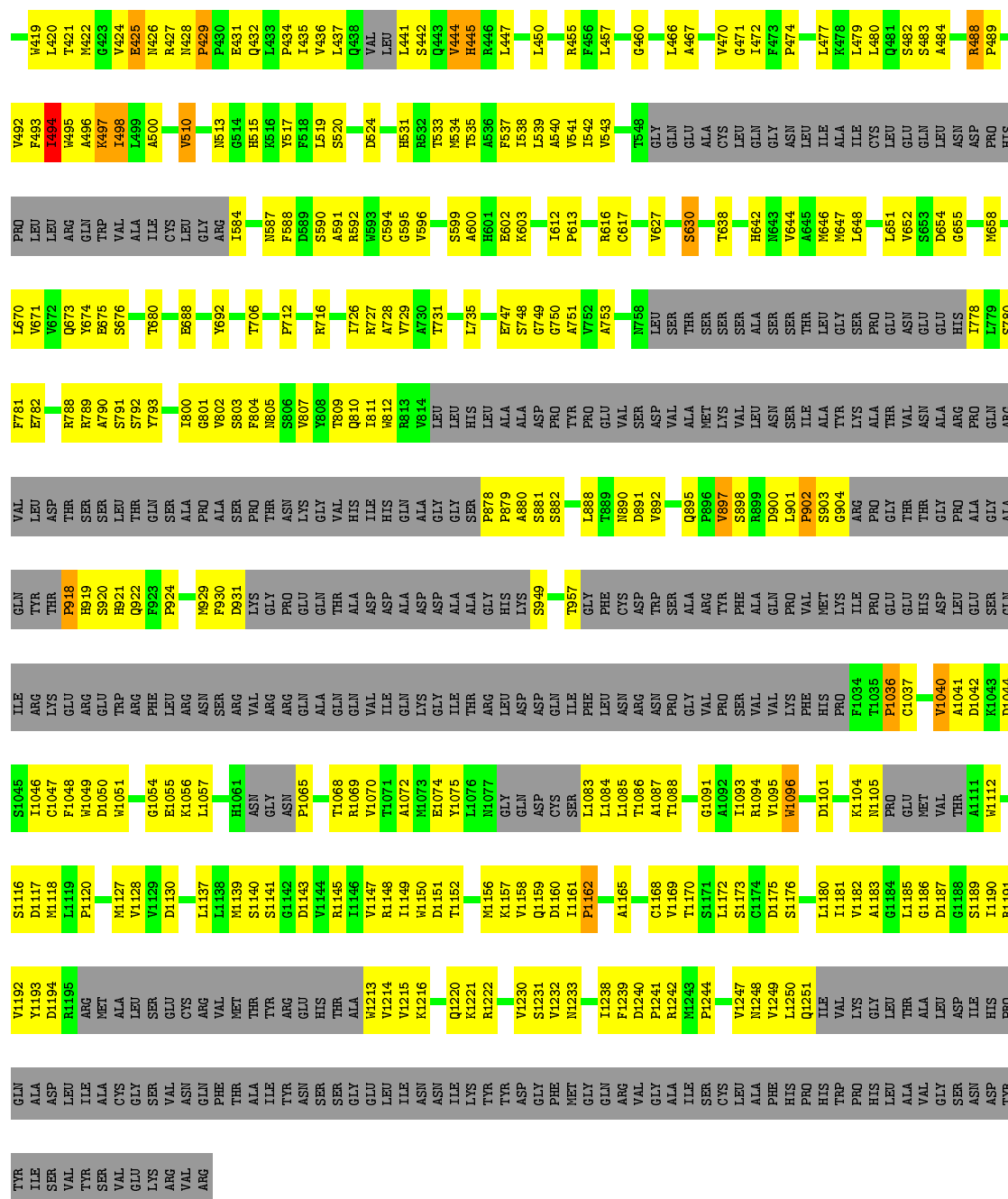
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
3	C	317	Total	C	N	O	S	0	0
			2456	1526	436	476	18		
3	c	317	Total	C	N	O	S	0	0
			2456	1526	436	476	18		





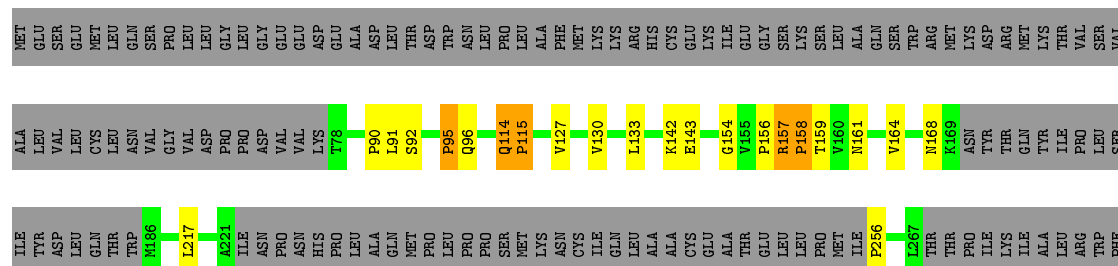




### • Molecule 2: Regulatory-associated protein of mTOR

Chain b: 55% 40%







Chain c:  95% . .

MET	ASN	THR	SER	PRO	GLY	THR	V8	Y20	S172	T214	L224	I260	P285	V324	LEU	GLY
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	----	-----	------	------	------	------	------	------	-----	-----

## 4 Experimental information

Property	Value	Source
Reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	Depositor
Number of particles used	115039	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	Not provided	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ )	Not provided	Depositor
Minimum defocus (nm)	1500	Depositor
Maximum defocus (nm)	2500	Depositor
Magnification	22500	Depositor
Image detector	Not provided	Depositor

## 5 Model quality ⓘ

### 5.1 Standard geometry ⓘ

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z  > 2	RMSZ	# Z  > 2
1	A	0.56	4/15910 (0.0%)	0.78	38/21634 (0.2%)
1	a	0.56	4/15910 (0.0%)	0.78	38/21634 (0.2%)
2	B	0.40	1/4567 (0.0%)	0.73	13/6217 (0.2%)
2	b	0.40	1/4567 (0.0%)	0.73	13/6217 (0.2%)
3	C	0.49	0/2514	0.68	1/3426 (0.0%)
3	c	0.49	0/2514	0.68	1/3426 (0.0%)
All	All	0.53	10/45982 (0.0%)	0.76	104/62554 (0.2%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	47
1	a	0	46
2	B	0	14
2	b	0	14
3	C	0	4
3	c	0	4
All	All	0	129

All (10) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	2313	TRP	CB-CG	-7.38	1.36	1.50
1	a	2313	TRP	CB-CG	-7.37	1.36	1.50
1	A	1619	TRP	CB-CG	-6.24	1.39	1.50
1	a	1619	TRP	CB-CG	-6.22	1.39	1.50
1	a	842	TRP	CB-CG	-5.75	1.40	1.50
1	A	842	TRP	CB-CG	-5.71	1.40	1.50
1	a	1620	TRP	CB-CG	-5.34	1.40	1.50
1	A	1620	TRP	CB-CG	-5.32	1.40	1.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	b	115	PRO	N-CD	5.13	1.55	1.47
2	B	115	PRO	N-CD	5.12	1.55	1.47

All (104) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	b	114	GLN	C-N-CD	-17.81	81.41	120.60
2	B	114	GLN	C-N-CD	-17.81	81.41	120.60
1	a	1113	LEU	CA-CB-CG	-10.98	90.05	115.30
1	A	1113	LEU	CA-CB-CG	-10.97	90.06	115.30
2	b	115	PRO	CA-N-CD	-10.09	97.38	111.50
2	B	115	PRO	CA-N-CD	-10.08	97.39	111.50
2	B	158	PRO	CA-N-CD	-9.13	98.72	111.50
2	b	158	PRO	CA-N-CD	-9.12	98.73	111.50
1	A	757	LEU	CA-CB-CG	-7.50	98.06	115.30
1	a	757	LEU	CA-CB-CG	-7.49	98.06	115.30
2	b	217	LEU	CB-CG-CD1	-7.10	98.93	111.00
2	B	217	LEU	CB-CG-CD1	-7.08	98.96	111.00
1	a	225	PRO	N-CA-CB	6.82	111.48	103.30
1	A	225	PRO	N-CA-CB	6.81	111.48	103.30
1	A	915	VAL	C-N-CA	6.64	138.29	121.70
1	a	915	VAL	C-N-CA	6.63	138.28	121.70
1	A	1114	LEU	CA-CB-CG	-6.61	100.09	115.30
1	a	1114	LEU	CA-CB-CG	-6.61	100.10	115.30
1	A	555	PRO	N-CA-CB	6.58	111.19	103.30
1	a	2115	LEU	CB-CG-CD1	-6.54	99.88	111.00
1	A	2115	LEU	CB-CG-CD1	-6.54	99.88	111.00
1	a	555	PRO	N-CA-CB	6.53	111.13	103.30
2	B	156	PRO	N-CA-CB	6.53	111.13	103.30
2	b	156	PRO	N-CA-CB	6.53	111.13	103.30
2	b	157	ARG	C-N-CD	-6.41	106.50	120.60
2	B	157	ARG	C-N-CD	-6.41	106.51	120.60
2	B	352	LEU	C-N-CA	6.34	137.54	121.70
2	b	352	LEU	C-N-CA	6.33	137.54	121.70
2	B	878	PRO	N-CA-CB	6.33	110.89	103.30
2	b	878	PRO	N-CA-CB	6.33	110.89	103.30
1	A	891	LEU	CA-CB-CG	-6.29	100.83	115.30
1	a	891	LEU	CA-CB-CG	-6.29	100.83	115.30
1	a	529	PRO	N-CA-CB	6.27	110.83	103.30
1	a	2305	LEU	CA-CB-CG	-6.25	100.92	115.30
1	A	529	PRO	N-CA-CB	6.25	110.80	103.30
1	A	2305	LEU	CA-CB-CG	-6.23	100.97	115.30

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	b	256	PRO	N-CA-CB	6.22	110.77	103.30
1	a	1180	LEU	CA-CB-CG	-6.22	100.99	115.30
1	A	1180	LEU	CA-CB-CG	-6.22	101.00	115.30
2	B	256	PRO	N-CA-CB	6.16	110.69	103.30
1	A	1873	LEU	CA-CB-CG	6.11	129.35	115.30
2	B	420	LEU	CA-CB-CG	-6.11	101.25	115.30
2	b	420	LEU	CA-CB-CG	-6.11	101.25	115.30
1	a	1873	LEU	CA-CB-CG	6.10	129.33	115.30
1	A	869	LEU	CA-CB-CG	6.09	129.30	115.30
1	a	869	LEU	CA-CB-CG	6.06	129.25	115.30
1	A	310	PRO	N-CA-CB	6.03	110.54	103.30
1	A	551	PRO	N-CA-CB	6.03	110.54	103.30
1	a	310	PRO	N-CA-CB	6.03	110.54	103.30
1	A	225	PRO	C-N-CA	6.01	136.74	121.70
1	a	551	PRO	N-CA-CB	6.01	110.52	103.30
1	a	225	PRO	C-N-CA	6.00	136.71	121.70
1	a	696	LEU	CA-CB-CG	-5.99	101.53	115.30
1	A	351	PRO	N-CA-CB	5.98	110.48	103.30
1	A	696	LEU	CA-CB-CG	-5.97	101.56	115.30
1	a	351	PRO	N-CA-CB	5.97	110.47	103.30
1	A	558	PRO	N-CA-CB	5.95	110.44	103.30
1	A	998	LEU	CA-CB-CG	-5.93	101.66	115.30
1	a	998	LEU	CA-CB-CG	-5.92	101.68	115.30
1	a	558	PRO	N-CA-CB	5.91	110.39	103.30
2	b	133	LEU	CA-CB-CG	-5.84	101.87	115.30
1	A	397	PRO	N-CA-CB	5.83	110.30	103.30
2	B	133	LEU	CA-CB-CG	-5.83	101.89	115.30
1	a	397	PRO	N-CA-CB	5.82	110.29	103.30
1	a	1609	PRO	N-CA-CB	5.82	110.29	103.30
1	a	1688	PRO	C-N-CA	-5.81	107.19	121.70
1	A	1609	PRO	N-CA-CB	5.80	110.27	103.30
1	A	1688	PRO	C-N-CA	-5.80	107.19	121.70
1	a	404	PRO	N-CA-CB	5.78	110.23	103.30
1	A	404	PRO	N-CA-CB	5.77	110.23	103.30
1	A	231	PRO	N-CA-CB	5.75	110.20	103.30
1	a	231	PRO	N-CA-CB	5.74	110.19	103.30
1	a	1550	LEU	CA-CB-CG	-5.66	102.28	115.30
1	A	1550	LEU	CA-CB-CG	-5.66	102.29	115.30
2	B	879	PRO	N-CA-CB	5.60	110.02	103.30
1	a	324	PRO	N-CA-CB	5.60	110.02	103.30
1	a	1096	LEU	CA-CB-CG	-5.59	102.43	115.30
2	b	879	PRO	N-CA-CB	5.58	110.00	103.30

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1096	LEU	CA-CB-CG	-5.58	102.47	115.30
1	A	324	PRO	N-CA-CB	5.58	109.99	103.30
1	a	315	PRO	N-CA-CB	5.51	109.92	103.30
1	A	315	PRO	N-CA-CB	5.50	109.89	103.30
1	a	574	PRO	N-CA-CB	5.46	109.85	103.30
1	a	1190	ILE	C-N-CA	5.45	135.33	121.70
1	A	574	PRO	N-CA-CB	5.44	109.82	103.30
1	A	1190	ILE	C-N-CA	5.43	135.28	121.70
1	A	349	PRO	N-CA-CB	5.42	109.80	103.30
1	A	1087	SER	C-N-CD	-5.41	108.69	120.60
1	a	349	PRO	N-CA-CB	5.40	109.78	103.30
1	a	1087	SER	C-N-CD	-5.39	108.73	120.60
1	a	1115	LEU	CA-CB-CG	-5.36	102.97	115.30
1	A	1115	LEU	CA-CB-CG	-5.36	102.98	115.30
1	a	828	LEU	CA-CB-CG	-5.15	103.45	115.30
1	A	828	LEU	CA-CB-CG	-5.15	103.46	115.30
1	A	1907	LEU	CA-CB-CG	-5.15	103.46	115.30
1	a	1907	LEU	CA-CB-CG	-5.14	103.48	115.30
3	C	224	LEU	CA-CB-CG	-5.09	103.59	115.30
3	c	224	LEU	CA-CB-CG	-5.09	103.59	115.30
2	B	510	VAL	C-N-CA	5.08	134.41	121.70
2	b	510	VAL	C-N-CA	5.08	134.41	121.70
1	A	636	LEU	CA-CB-CG	-5.08	103.62	115.30
1	a	636	LEU	CA-CB-CG	-5.08	103.62	115.30
1	A	568	PRO	N-CA-CB	5.01	109.31	103.30
1	a	568	PRO	N-CA-CB	5.01	109.31	103.30

There are no chirality outliers.

All (129) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1025	SER	Peptide
1	A	1028	ARG	Peptide
1	A	1067	PHE	Peptide
1	A	1075	ILE	Peptide
1	A	1082	PHE	Peptide
1	A	1087	SER	Peptide
1	A	1109	ASP	Peptide
1	A	1124	ALA	Peptide
1	A	1125	PRO	Peptide
1	A	1148	PHE	Peptide
1	A	1310	TYR	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1444	GLU	Peptide
1	A	1472	ASP	Peptide
1	A	1582	SER	Peptide
1	A	1605	TYR	Peptide
1	A	1732	ILE	Peptide
1	A	1762	GLN	Peptide
1	A	1787	TYR	Peptide
1	A	1809	GLN	Peptide
1	A	1895	SER	Peptide
1	A	1899	ASN	Peptide
1	A	1950	ARG	Peptide
1	A	2127	SER	Peptide
1	A	226	LYS	Peptide
1	A	257	ARG	Peptide
1	A	260	ARG	Peptide
1	A	261	ILE	Peptide
1	A	275	SER	Peptide
1	A	324	PRO	Peptide
1	A	331	VAL	Peptide
1	A	352	ALA	Peptide
1	A	603	VAL	Peptide
1	A	628	ARG	Peptide
1	A	714	THR	Peptide
1	A	716	GLY	Peptide
1	A	718	LEU	Peptide
1	A	776	LEU	Peptide
1	A	836	LYS	Peptide
1	A	856	GLU	Peptide
1	A	857	PRO	Peptide
1	A	874	THR	Peptide
1	A	899	HIS	Peptide
1	A	900	LYS	Peptide
1	A	914	ALA	Peptide
1	A	970	MET	Peptide
1	A	989	PHE	Peptide
1	A	990	LEU	Peptide
2	B	1070	VAL	Peptide
2	B	1096	TRP	Peptide
2	B	114	GLN	Peptide
2	B	157	ARG	Peptide
2	B	161	ASN	Peptide
2	B	343	VAL	Peptide

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
2	B	371	PRO	Peptide
2	B	408	PHE	Peptide
2	B	429	PRO	Peptide
2	B	445	HIS	Peptide
2	B	474	PRO	Peptide
2	B	494	ILE	Peptide
2	B	498	ILE	Peptide
2	B	644	VAL	Peptide
3	C	172	SER	Peptide
3	C	20	TYR	Peptide
3	C	214	THR	Peptide
3	C	260	ILE	Peptide
1	a	1025	SER	Peptide
1	a	1028	ARG	Peptide
1	a	1067	PHE	Peptide
1	a	1075	ILE	Peptide
1	a	1082	PHE	Peptide
1	a	1087	SER	Peptide
1	a	1109	ASP	Peptide
1	a	1124	ALA	Peptide
1	a	1125	PRO	Peptide
1	a	1148	PHE	Peptide
1	a	1310	TYR	Peptide
1	a	1444	GLU	Peptide
1	a	1472	ASP	Peptide
1	a	1582	SER	Peptide
1	a	1605	TYR	Peptide
1	a	1732	ILE	Peptide
1	a	1762	GLN	Peptide
1	a	1787	TYR	Peptide
1	a	1895	SER	Peptide
1	a	1899	ASN	Peptide
1	a	1950	ARG	Peptide
1	a	2127	SER	Peptide
1	a	226	LYS	Peptide
1	a	257	ARG	Peptide
1	a	260	ARG	Peptide
1	a	261	ILE	Peptide
1	a	275	SER	Peptide
1	a	324	PRO	Peptide
1	a	331	VAL	Peptide
1	a	352	ALA	Peptide

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	a	603	VAL	Peptide
1	a	628	ARG	Peptide
1	a	714	THR	Peptide
1	a	716	GLY	Peptide
1	a	718	LEU	Peptide
1	a	776	LEU	Peptide
1	a	836	LYS	Peptide
1	a	856	GLU	Peptide
1	a	857	PRO	Peptide
1	a	874	THR	Peptide
1	a	899	HIS	Peptide
1	a	900	LYS	Peptide
1	a	914	ALA	Peptide
1	a	970	MET	Peptide
1	a	989	PHE	Peptide
1	a	990	LEU	Peptide
2	b	1070	VAL	Peptide
2	b	1096	TRP	Peptide
2	b	114	GLN	Peptide
2	b	157	ARG	Peptide
2	b	161	ASN	Peptide
2	b	343	VAL	Peptide
2	b	371	PRO	Peptide
2	b	408	PHE	Peptide
2	b	429	PRO	Peptide
2	b	445	HIS	Peptide
2	b	474	PRO	Peptide
2	b	494	ILE	Peptide
2	b	498	ILE	Peptide
2	b	644	VAL	Peptide
3	c	172	SER	Peptide
3	c	20	TYR	Peptide
3	c	214	THR	Peptide
3	c	260	ILE	Peptide

## 5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	15617	0	14621	2309	0
1	a	15617	0	14621	0	0
2	B	4553	0	2926	333	0
2	b	4553	0	2926	0	0
3	C	2456	0	2341	423	0
3	c	2456	0	2341	0	0
All	All	45252	0	39776	3046	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 36.

All (3046) 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:B:89:ASP:HB3	2:B:153:HIS:CB	1.53	1.38
2:B:82:ALA:O	2:B:115:PRO:HB2	1.24	1.36
2:B:111:GLU:HA	2:B:114:GLN:HA	1.27	1.14
2:B:142:LYS:O	2:B:143:GLU:O	1.73	1.07
1:A:912:ALA:O	1:A:1622:ARG:NH2	1.88	1.06
2:B:89:ASP:CB	2:B:153:HIS:CB	2.35	1.05
3:C:173:ILE:HA	3:C:189:ASN:HA	1.38	1.04
1:A:1019:LEU:HA	1:A:1022:PHE:HD2	1.24	1.03
1:A:731:ARG:HD3	1:A:1150:ASP:HA	103.25	1.03
2:B:89:ASP:HB2	2:B:152:GLY:O	1.58	1.03
2:B:156:PRO:O	2:B:158:PRO:HD3	1.59	1.02
1:A:2192:LEU:HB2	1:A:2229:PRO:HG3	1.42	1.01
2:B:424:VAL:O	2:B:426:ASN:CG	1.97	1.00
1:A:1941:GLN:HG3	1:A:2197:ARG:HE	1.23	1.00
1:A:975:ILE:O	1:A:979:PHE:N	1.95	1.00
2:B:89:ASP:HB3	2:B:153:HIS:CA	1.92	0.99
2:B:89:ASP:CB	2:B:153:HIS:CA	2.41	0.99
1:A:1148:PHE:HE2	1:A:1183:GLN:HB2	1.29	0.97
1:A:1797:ASN:HB2	1:A:1884:ALA:HB2	1.47	0.97
1:A:1581:GLU:HG2	1:A:1584:SER:HB2	1.48	0.95
1:A:2289:HIS:O	1:A:2293:ASN:ND2	2.00	0.95
1:A:2310:SER:O	1:A:2314:PHE:N	2.00	0.95
1:A:1102:LEU:O	1:A:1141:ARG:NH2	2.01	0.94
2:B:89:ASP:HB2	2:B:152:GLY:C	1.87	0.94
2:B:1181:ILE:HB	2:B:1193:TYR:HB2	1.49	0.94
1:A:2415:MET:HE1	1:A:2505:ARG:HH11	1.34	0.94
2:B:210:ALA:O	2:B:214:GLU:N	2.01	0.93
1:A:2128:PRO:HA	1:A:2131:LEU:HB3	1.49	0.93

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2189:HIS:HA	1:A:2233:ASN:HB3	1.50	0.93
1:A:1199:LEU:HD22	1:A:1204:ILE:HD12	1.52	0.92
1:A:1726:GLN:O	1:A:1730:HIS:ND1	2.03	0.92
1:A:673:TYR:HA	1:A:676:LEU:HB2	1.50	0.92
1:A:545:LEU:O	1:A:549:HIS:CB	2.19	0.91
1:A:1090:ARG:HD2	1:A:1094:ILE:HG13	1.53	0.91
1:A:1901:GLN:HE21	1:A:1905:ARG:HH21	1.16	0.91
2:B:162:GLY:O	2:B:166:VAL:N	2.04	0.90
1:A:1601:GLU:OE1	1:A:1619:TRP:NE1	2.04	0.90
1:A:1875:LYS:O	1:A:1879:MET:N	2.05	0.90
3:C:239:SER:OG	3:C:241:ASP:OD1	1.89	0.90
1:A:1340:SER:O	1:A:1344:ALA:N	2.05	0.89
2:B:89:ASP:CB	2:B:153:HIS:N	2.36	0.89
2:B:207:LYS:O	2:B:211:LEU:N	2.05	0.89
2:B:206:PHE:O	2:B:210:ALA:N	2.06	0.89
3:C:60:ALA:HA	3:C:65:ILE:HA	1.54	0.89
3:C:9:GLY:HA2	3:C:71:ASN:HA	1.55	0.89
1:A:701:ASN:HB3	1:A:704:VAL:HB	1.55	0.89
1:A:722:ASN:O	1:A:726:VAL:N	2.06	0.89
1:A:1581:GLU:HG3	1:A:1586:ALA:HB3	1.55	0.89
1:A:909:SER:H	1:A:1568:ARG:HH22	0.90	0.89
1:A:1181:VAL:HG12	1:A:1216:ILE:HD12	1.55	0.88
3:C:188:VAL:HG11	3:C:225:GLN:HA	1.56	0.88
2:B:95:PRO:O	2:B:96:GLN:HB2	1.73	0.88
1:A:1584:SER:O	1:A:1587:TYR:N	2.05	0.88
3:C:198:ASN:HB2	3:C:211:ILE:HB	1.54	0.88
1:A:1391:ARG:HH21	1:A:1395:LYS:HE3	1.39	0.88
1:A:2502:ASN:OD1	1:A:2505:ARG:NH2	2.07	0.88
1:A:1551:ALA:HB3	1:A:1560:ALA:HB2	1.56	0.88
2:B:422:MET:CG	2:B:434:PRO:HG2	2.04	0.88
2:B:82:ALA:O	2:B:115:PRO:CB	2.18	0.88
1:A:1495:GLN:O	1:A:1499:GLU:N	2.08	0.87
1:A:755:ARG:NH2	2:B:479:LEU:O	131.63	0.87
3:C:225:GLN:H	3:C:238:CYS:HB2	1.40	0.87
3:C:239:SER:HB3	3:C:243:THR:H	1.40	0.87
2:B:111:GLU:CA	2:B:114:GLN:HA	2.05	0.87
1:A:1028:ARG:O	1:A:1031:MET:N	2.07	0.86
1:A:2084:TRP:HA	1:A:2087:LYS:HD2	1.57	0.86
1:A:2378:ARG:NH2	1:A:2545:TRP:O	2.08	0.86
1:A:1483:CYS:O	1:A:1487:LEU:N	2.08	0.86
1:A:1557:PHE:O	1:A:1561:GLN:N	2.08	0.86

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:244:CYS:HB3	3:C:258:LEU:HB2	1.57	0.86
3:C:285:ILE:HG23	3:C:297:TRP:HB2	1.56	0.86
1:A:2214:THR:O	1:A:2218:LYS:N	2.07	0.86
1:A:2007:GLN:O	1:A:2011:MET:N	2.09	0.86
1:A:2408:ARG:NH2	1:A:2519:LEU:O	2.09	0.86
1:A:2228:ILE:HB	1:A:2236:LEU:HB2	1.58	0.86
1:A:735:ILE:H	1:A:738:LEU:HD12	1.41	0.86
1:A:908:GLN:O	1:A:912:ALA:N	2.09	0.86
1:A:2066:LYS:HB2	1:A:2125:TYR:HB3	1.58	0.85
1:A:788:PRO:O	1:A:791:ASN:N	2.09	0.85
1:A:1148:PHE:CE2	1:A:1183:GLN:HB2	2.10	0.85
1:A:1075:ILE:H	1:A:1078:MET:HG2	1.41	0.85
2:B:1242:ARG:HA	2:B:1247:VAL:HA	1.59	0.85
3:C:154:ILE:HB	3:C:163:GLU:HB2	1.59	0.85
1:A:909:SER:H	1:A:1568:ARG:NH2	1.74	0.85
1:A:1382:LEU:O	1:A:1386:ARG:N	2.10	0.84
1:A:1677:LEU:HB3	1:A:1679:VAL:HG22	1.57	0.84
1:A:1021:SER:HA	1:A:1024:LYS:HD2	1.59	0.84
1:A:2343:ASN:ND2	1:A:2357:ASP:OD2	2.11	0.84
1:A:1287:LEU:O	1:A:1291:LEU:N	2.09	0.84
1:A:1449:TRP:O	1:A:1453:LEU:N	2.10	0.84
2:B:1147:VAL:HB	2:B:1162:PRO:HB2	1.58	0.84
1:A:836:LYS:HB3	1:A:840:ALA:HB2	1.60	0.84
2:B:781:PHE:O	2:B:1249:VAL:N	2.11	0.84
1:A:1063:LEU:O	1:A:1070:TYR:OH	1.96	0.84
1:A:2341:PRO:HG2	1:A:2549:TRP:HE3	1.43	0.84
1:A:1043:VAL:O	1:A:1080:ARG:NH2	2.11	0.84
1:A:1444:GLU:HG3	1:A:1449:TRP:HE1	1.41	0.83
1:A:1344:ALA:O	1:A:1348:GLN:N	2.11	0.83
1:A:1309:ALA:HB3	1:A:1310:TYR:HA	1.59	0.83
3:C:98:ARG:NE	3:C:113:ASP:OD1	2.11	0.83
1:A:864:LEU:HA	1:A:867:VAL:HB	1.61	0.83
3:C:12:PRO:HA	3:C:54:ARG:HH12	1.44	0.83
1:A:1891:SER:O	1:A:1895:SER:N	2.12	0.83
1:A:1046:THR:O	1:A:1080:ARG:NH1	2.12	0.83
1:A:1390:CYS:O	1:A:1394:ALA:N	2.12	0.83
1:A:2230:LEU:HG	1:A:2235:GLY:HA2	1.61	0.83
2:B:111:GLU:HA	2:B:114:GLN:CA	2.09	0.83
1:A:743:HIS:O	1:A:750:LYS:NZ	2.12	0.82
1:A:902:ASN:O	1:A:906:ILE:N	2.12	0.82
1:A:1878:LEU:HD11	1:A:1918:ASP:HB2	1.61	0.82

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:960:ARG:HB3	1:A:979:PHE:CZ	2.14	0.82
1:A:1014:GLN:O	1:A:1018:MET:N	2.12	0.82
1:A:1623:LEU:O	1:A:1626:CYS:N	2.12	0.82
1:A:1632:ASP:N	1:A:1632:ASP:OD1	2.11	0.82
1:A:869:LEU:HB3	1:A:873:LYS:HE3	1.62	0.82
1:A:1139:VAL:HG22	1:A:1176:THR:HA	1.62	0.82
1:A:2185:LEU:N	1:A:2237:ILE:O	2.12	0.82
1:A:731:ARG:NH1	1:A:1150:ASP:OD1	104.72	0.82
1:A:2053:PRO:O	1:A:2057:MET:N	2.12	0.82
2:B:165:TRP:O	2:B:213:ARG:NH1	2.13	0.82
1:A:1930:ILE:HD11	1:A:1934:THR:HG21	1.62	0.82
1:A:790:PRO:O	1:A:793:GLY:N	2.13	0.82
1:A:2381:ARG:NE	1:A:2548:PHE:O	2.12	0.81
2:B:538:ILE:O	2:B:542:ILE:N	2.10	0.81
1:A:2094:VAL:O	1:A:2098:THR:N	2.12	0.81
1:A:2190:GLU:N	1:A:2233:ASN:O	2.13	0.81
1:A:1490:TRP:O	1:A:1494:HIS:N	2.13	0.81
1:A:2277:HIS:O	3:C:87:ASN:ND2	2.13	0.81
1:A:2347:ASP:OD2	1:A:2350:SER:N	2.13	0.81
2:B:1183:ALA:HB3	2:B:1191:ARG:HB2	1.63	0.81
1:A:1410:PRO:HG3	1:A:1440:PHE:HB3	1.63	0.81
1:A:742:GLU:O	1:A:746:ILE:N	2.13	0.81
1:A:921:LYS:HA	1:A:924:GLN:HB2	1.63	0.81
1:A:2169:PRO:HB3	1:A:2187:LYS:HG2	1.63	0.81
1:A:1343:LEU:O	1:A:1347:SER:N	2.14	0.81
3:C:218:ALA:HB1	3:C:237:THR:HG21	1.62	0.81
1:A:2363:GLU:O	1:A:2367:THR:N	2.12	0.81
1:A:859:ARG:HA	1:A:861:TYR:CZ	2.16	0.81
1:A:2336:LEU:HD21	1:A:2339:ARG:HH21	1.46	0.80
1:A:833:LEU:HA	1:A:836:LYS:HB2	1.62	0.80
1:A:642:HIS:HB3	1:A:643:VAL:HG23	1.63	0.80
1:A:771:TYR:CE1	1:A:1112:HIS:HB3	82.43	0.80
1:A:1400:LYS:HD3	1:A:1416:LEU:HA	1.63	0.80
2:B:191:ILE:N	2:B:263:PHE:O	2.13	0.80
1:A:1259:HIS:O	1:A:1263:ILE:N	2.13	0.80
1:A:1478:LEU:O	1:A:1482:ARG:N	2.14	0.80
1:A:1667:ALA:O	1:A:1671:LYS:N	2.12	0.80
1:A:1793:TRP:O	1:A:1797:ASN:ND2	2.15	0.80
1:A:1915:HIS:HA	1:A:1952:LEU:HB2	1.63	0.80
2:B:135:THR:HA	2:B:138:ARG:HB2	1.64	0.80
1:A:1170:ARG:HE	1:A:1204:ILE:HG12	1.45	0.80

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1626:CYS:HB3	1:A:1628:ARG:HG3	1.64	0.80
1:A:837:ARG:O	1:A:840:ALA:N	2.14	0.80
2:B:1193:TYR:HA	2:B:1216:LYS:HA	1.62	0.80
3:C:24:VAL:N	3:C:38:VAL:O	2.13	0.80
2:B:89:ASP:CG	2:B:153:HIS:N	2.36	0.80
1:A:1039:ARG:HA	1:A:1042:TRP:HD1	1.47	0.80
1:A:657:SER:HB3	1:A:673:TYR:CE2	2.17	0.80
1:A:755:ARG:HH22	2:B:483:SER:H	134.54	0.79
1:A:1336:GLU:O	1:A:1340:SER:N	2.12	0.79
1:A:1917:PRO:O	1:A:1921:GLU:N	2.16	0.79
1:A:949:ALA:O	1:A:953:VAL:N	2.15	0.79
1:A:908:GLN:HB2	1:A:1568:ARG:NH2	1.97	0.79
1:A:2195:ASP:HA	1:A:2198:VAL:HB	1.64	0.79
3:C:65:ILE:HB	3:C:81:TYR:HD2	1.48	0.79
1:A:1393:TYR:HA	1:A:1419:ILE:HD11	1.64	0.79
1:A:1804:TYR:O	1:A:1808:ASN:N	2.15	0.79
1:A:981:SER:O	1:A:985:LYS:N	2.13	0.79
1:A:1464:ASP:OD1	1:A:1480:ARG:NE	2.14	0.79
1:A:1042:TRP:O	1:A:1080:ARG:NH1	2.15	0.79
2:B:85:GLU:HB3	2:B:148:PHE:HA	1.65	0.79
1:A:1956:LEU:HA	1:A:1959:GLN:HB3	1.63	0.79
1:A:593:GLU:O	1:A:597:HIS:N	2.16	0.79
1:A:948:PRO:O	1:A:952:MET:N	2.12	0.79
2:B:202:ILE:O	2:B:205:SER:OG	2.00	0.79
3:C:113:ASP:O	3:C:116:SER:OG	2.01	0.79
1:A:1444:GLU:HG3	1:A:1449:TRP:NE1	1.98	0.78
1:A:1585:ARG:O	1:A:1589:ALA:N	2.13	0.78
1:A:2340:HIS:HB3	1:A:2545:TRP:CD1	2.18	0.78
1:A:740:GLU:HA	1:A:743:HIS:HD2	1.48	0.78
1:A:1042:TRP:HB2	1:A:1077:HIS:CE1	2.19	0.78
1:A:1304:TRP:O	1:A:1308:GLN:N	2.16	0.78
1:A:2005:LEU:O	1:A:2009:ALA:N	2.14	0.78
1:A:2102:ASP:O	1:A:2106:HIS:N	2.13	0.78
1:A:970:MET:HB3	1:A:972:VAL:H	1.48	0.78
1:A:909:SER:N	1:A:1568:ARG:HH22	1.76	0.78
1:A:1705:TRP:HZ2	1:A:1760:ASN:HD22	1.31	0.78
1:A:683:PHE:HA	1:A:686:HIS:HD2	1.47	0.78
3:C:123:ARG:NH1	3:C:157:LEU:O	2.16	0.78
1:A:1356:THR:O	1:A:1391:ARG:NH1	2.15	0.78
1:A:2279:THR:N	1:A:2282:GLN:OE1	2.17	0.78
1:A:596:GLY:HA2	1:A:599:LEU:HB2	1.66	0.78

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:153:HIS:O	2:B:155:VAL:N	2.17	0.78
3:C:225:GLN:O	3:C:238:CYS:N	2.11	0.78
1:A:1354:THR:O	1:A:1358:LEU:N	2.15	0.78
1:A:520:VAL:O	1:A:524:LEU:N	2.15	0.78
1:A:606:CYS:HB3	1:A:607:ALA:HA	1.66	0.78
1:A:1446:GLN:O	1:A:1450:TYR:N	2.14	0.78
1:A:672:ARG:O	1:A:676:LEU:N	2.17	0.78
2:B:203:VAL:HA	2:B:206:PHE:HD2	1.48	0.78
3:C:196:VAL:N	3:C:214:THR:O	2.17	0.78
1:A:1275:VAL:O	1:A:1279:ASP:N	2.16	0.78
1:A:1567:ALA:HA	1:A:1570:LEU:HD12	1.66	0.78
1:A:902:ASN:HA	1:A:905:MET:HB2	1.66	0.78
2:B:1095:VAL:O	2:B:1116:SER:N	2.14	0.78
3:C:172:SER:HB3	3:C:190:SER:HB3	1.66	0.78
1:A:2028:HIS:CG	1:A:2115:LEU:HD11	2.19	0.78
1:A:598:SER:O	1:A:602:PHE:N	2.15	0.78
1:A:2229:PRO:HA	1:A:2235:GLY:HA3	1.66	0.78
3:C:102:THR:HG1	3:C:112:TRP:HE1	1.30	0.77
1:A:1549:VAL:O	1:A:1553:HIS:N	2.17	0.77
1:A:2333:ILE:HA	1:A:2507:LYS:HD3	1.66	0.77
1:A:1991:ALA:O	1:A:1995:LEU:N	2.14	0.77
2:B:1050:ASP:O	2:B:1054:GLY:N	2.18	0.77
1:A:1360:LEU:N	1:A:1391:ARG:HH22	1.82	0.77
1:A:1527:ASP:HA	1:A:1530:GLU:HB3	1.66	0.77
2:B:89:ASP:HB2	2:B:153:HIS:N	1.99	0.77
1:A:1595:MET:O	1:A:1599:LEU:N	2.16	0.77
1:A:308:THR:O	1:A:312:HIS:N	2.18	0.77
1:A:1551:ALA:O	1:A:1556:LEU:N	2.15	0.77
1:A:721:MET:HB3	1:A:725:PHE:HE2	1.49	0.77
1:A:1765:ASN:O	1:A:1768:THR:OG1	2.03	0.77
1:A:1148:PHE:HB2	1:A:1184:LEU:HD12	1.66	0.77
1:A:960:ARG:HH21	1:A:978:ILE:HG22	1.50	0.77
1:A:1594:HIS:O	1:A:1597:SER:OG	2.03	0.77
1:A:908:GLN:NE2	1:A:1568:ARG:O	2.18	0.77
1:A:1106:ASN:HB3	1:A:1107:LEU:HB2	1.67	0.76
1:A:1007:ALA:HA	1:A:1008:ILE:HB	1.67	0.76
1:A:2431:LEU:O	1:A:2435:ASN:N	2.15	0.76
1:A:320:GLN:O	1:A:324:PRO:N	2.19	0.76
1:A:1187:LYS:HA	1:A:1190:ILE:HD12	1.67	0.76
1:A:717:ARG:HH12	1:A:748:ARG:HD2	1.50	0.76
1:A:2065:LEU:HB2	1:A:2125:TYR:HA	1.68	0.76

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:269:ASN:O	1:A:273:ARG:N	2.16	0.76
1:A:654:ASP:HB3	1:A:658:LYS:HE3	1.68	0.76
2:B:592:ARG:O	2:B:596:VAL:N	2.19	0.76
1:A:1026:HIS:HB2	1:A:1031:MET:HE2	1.68	0.76
1:A:1988:HIS:O	1:A:1992:ASN:ND2	2.19	0.76
1:A:2223:GLN:HB2	1:A:2354:LEU:HD13	1.68	0.76
1:A:2523:THR:O	1:A:2527:LEU:N	2.14	0.76
2:B:142:LYS:O	2:B:143:GLU:C	2.24	0.76
1:A:2395:ASN:O	1:A:2399:THR:N	2.14	0.76
1:A:714:THR:H	1:A:717:ARG:HH21	1.31	0.76
1:A:787:ASP:HB2	1:A:828:LEU:HD13	1.66	0.76
3:C:62:TYR:CE1	3:C:86:LYS:HA	2.21	0.76
1:A:863:THR:O	1:A:867:VAL:N	2.16	0.76
1:A:641:ALA:HA	1:A:642:HIS:CG	2.21	0.75
1:A:788:PRO:HD3	1:A:828:LEU:HD22	1.68	0.75
1:A:1082:PHE:HZ	1:A:1114:LEU:HD23	1.52	0.75
1:A:1092:VAL:HG13	1:A:1095:LYS:HD2	1.68	0.75
1:A:1177:LEU:HA	1:A:1180:LEU:HD12	1.68	0.75
1:A:2340:HIS:CE1	1:A:2342:SER:HB2	2.21	0.75
2:B:114:GLN:O	2:B:115:PRO:HG3	1.86	0.75
1:A:1043:VAL:N	1:A:1077:HIS:HE1	1.84	0.75
1:A:394:ASN:O	1:A:397:PRO:N	2.19	0.75
2:B:165:TRP:HB3	2:B:213:ARG:NE	2.01	0.75
1:A:2028:HIS:CD2	1:A:2115:LEU:HD11	2.21	0.75
1:A:633:SER:O	1:A:637:ILE:N	2.19	0.75
1:A:610:PHE:O	1:A:614:GLU:N	2.19	0.75
1:A:771:TYR:CZ	1:A:1112:HIS:HB3	83.55	0.75
1:A:960:ARG:NH1	1:A:979:PHE:HA	2.02	0.75
1:A:1596:LEU:O	1:A:1600:GLU:N	2.17	0.75
1:A:2379:LEU:O	1:A:2384:THR:OG1	2.05	0.75
1:A:1655:LYS:HA	1:A:1658:SER:HB3	1.68	0.75
1:A:662:VAL:O	1:A:665:THR:OG1	2.04	0.75
2:B:895:GLN:N	2:B:900:ASP:O	2.20	0.75
1:A:1473:ASP:HB2	1:A:1476:LEU:HG	1.69	0.74
1:A:1886:GLN:O	1:A:1890:ARG:N	2.20	0.74
1:A:768:ILE:HA	1:A:771:TYR:CD2	2.22	0.74
1:A:1262:THR:O	1:A:1266:GLN:N	2.16	0.74
1:A:1521:TRP:HB2	1:A:1529:MET:SD	2.27	0.74
1:A:761:VAL:O	1:A:764:ALA:N	2.20	0.74
1:A:826:ASP:HA	1:A:829:GLN:CD	2.07	0.74
1:A:1103:PHE:CE1	1:A:1140:ASP:HB3	2.23	0.74

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1417:ILE:HA	1:A:1420:ASN:HD22	1.52	0.74
1:A:1571:LEU:HD12	1:A:1574:GLU:HB3	1.70	0.74
3:C:189:ASN:OD1	3:C:192:GLY:N	2.20	0.74
1:A:1067:PHE:HB2	1:A:1070:TYR:CE1	2.23	0.74
1:A:1475:GLU:O	1:A:1479:GLY:N	2.19	0.74
1:A:1674:VAL:O	1:A:1678:GLY:N	2.14	0.74
2:B:1069:ARG:N	2:B:1087:ALA:O	2.19	0.74
2:B:588:PHE:HA	2:B:591:ALA:HB3	1.70	0.74
3:C:111:ILE:HB	3:C:123:ARG:HB2	1.69	0.74
1:A:865:LEU:N	1:A:910:ARG:HH21	1.84	0.74
3:C:109:ALA:N	3:C:125:PHE:O	2.15	0.74
1:A:1393:TYR:O	1:A:1397:LEU:N	2.16	0.74
1:A:2141:PRO:HB3	1:A:2236:LEU:HD13	1.69	0.74
1:A:595:GLU:O	1:A:599:LEU:N	2.21	0.74
1:A:982:LEU:O	1:A:986:CYS:N	2.21	0.74
1:A:1626:CYS:HB3	1:A:1628:ARG:CG	2.18	0.74
3:C:213:LYS:NZ	3:C:250:SER:O	2.21	0.74
1:A:1630:VAL:O	1:A:1633:TRP:N	2.20	0.74
1:A:1906:VAL:HG13	1:A:1923:LEU:HD22	1.70	0.74
2:B:213:ARG:O	2:B:217:LEU:HD11	1.87	0.74
2:B:706:THR:HA	2:B:778:ILE:HA	1.70	0.74
3:C:194:CYS:O	3:C:216:ILE:N	2.19	0.74
1:A:583:THR:O	1:A:587:ARG:N	2.21	0.73
3:C:132:ASN:ND2	3:C:147:ASP:O	2.21	0.73
1:A:1163:LEU:HD22	1:A:1202:HIS:HB2	1.70	0.73
1:A:1659:LEU:O	1:A:1663:SER:N	2.21	0.73
1:A:1795:VAL:O	1:A:1799:GLU:N	2.20	0.73
1:A:1995:LEU:O	1:A:1999:CYS:N	2.21	0.73
1:A:1060:VAL:O	1:A:1064:GLY:N	2.19	0.73
1:A:2127:SER:OG	1:A:2130:LEU:N	2.18	0.73
1:A:594:PHE:HZ	1:A:628:ARG:HD3	1.52	0.73
1:A:702:ASP:HA	1:A:705:PHE:HD2	1.54	0.73
1:A:1472:ASP:OD1	1:A:1477:MET:N	2.21	0.73
1:A:2130:LEU:O	1:A:2133:CYS:N	2.21	0.73
1:A:2302:LEU:O	1:A:2306:LYS:N	2.18	0.73
1:A:2218:LYS:NZ	1:A:2402:THR:OG1	2.21	0.73
1:A:2411:LYS:HB2	1:A:2508:LEU:HD13	1.69	0.73
1:A:950:VAL:O	1:A:954:ALA:N	2.20	0.73
2:B:146:VAL:N	2:B:188:SER:O	2.21	0.73
1:A:1536:ILE:O	1:A:1547:ARG:NH2	2.22	0.73
1:A:1941:GLN:HA	1:A:2197:ARG:HH21	1.53	0.73

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1047:SER:N	1:A:1048:ILE:HA	2.04	0.73
1:A:1871:GLU:HA	1:A:1874:SER:HB2	1.71	0.73
1:A:597:HIS:O	1:A:600:THR:OG1	2.06	0.73
2:B:793:TYR:HA	2:B:800:ILE:HA	1.71	0.73
2:B:810:GLN:HA	2:B:881:SER:HA	1.70	0.73
3:C:151:ALA:HB1	3:C:164:GLN:HE21	1.52	0.73
3:C:67:MET:SD	3:C:81:TYR:OH	2.44	0.73
1:A:1634:GLN:O	1:A:1638:MET:N	2.16	0.73
1:A:934:MET:O	1:A:938:MET:N	2.21	0.73
1:A:2005:LEU:HG	1:A:2138:LEU:HD12	1.69	0.73
1:A:683:PHE:HA	1:A:686:HIS:CD2	2.24	0.73
1:A:1041:PHE:HA	1:A:1044:MET:HB2	1.71	0.73
1:A:1202:HIS:HD2	1:A:1204:ILE:HD11	1.54	0.73
2:B:266:CYS:HB2	2:B:435:ILE:H	1.54	0.73
2:B:495:TRP:O	2:B:497:LYS:N	2.21	0.73
3:C:165:LEU:HD22	3:C:210:LEU:HD13	1.70	0.73
1:A:1464:ASP:O	1:A:1468:ASP:N	2.22	0.73
1:A:1424:GLN:NE2	1:A:1583:TYR:O	2.22	0.73
2:B:200:GLY:O	2:B:204:LYS:N	2.19	0.72
2:B:533:THR:O	2:B:537:PHE:N	2.20	0.72
2:B:805:ASN:HA	2:B:888:LEU:HA	1.71	0.72
3:C:227:ARG:NH1	3:C:276:CYS:O	2.22	0.72
3:C:11:ASP:O	3:C:54:ARG:NH2	2.22	0.72
3:C:65:ILE:HD12	3:C:81:TYR:HB2	1.70	0.72
1:A:2311:GLU:OE1	1:A:2311:GLU:N	2.20	0.72
1:A:635:HIS:O	1:A:638:SER:OG	2.07	0.72
2:B:134:CYS:O	2:B:138:ARG:N	2.21	0.72
1:A:1461:VAL:HA	1:A:1464:ASP:HB2	1.72	0.72
1:A:1758:GLN:O	1:A:1762:GLN:N	2.20	0.72
1:A:2506:ASP:HB3	1:A:2512:ASP:HA	1.70	0.72
2:B:198:ASN:O	2:B:202:ILE:N	2.16	0.72
2:B:809:THR:N	2:B:882:SER:O	2.22	0.72
3:C:298:CYS:O	3:C:302:GLY:N	2.18	0.72
3:C:63:GLN:HA	3:C:84:VAL:HB	1.72	0.72
1:A:1598:GLU:HA	1:A:1601:GLU:CD	2.10	0.72
1:A:1994:ILE:O	1:A:1998:MET:N	2.22	0.72
1:A:415:ASP:O	1:A:419:HIS:N	2.19	0.72
1:A:729:PHE:HD1	1:A:732:LYS:HE3	1.54	0.72
2:B:811:ILE:N	2:B:880:ALA:O	2.17	0.72
1:A:1540:THR:HB	1:A:1543:GLY:H	1.55	0.72
1:A:1694:PRO:HB3	1:A:1720:PHE:HZ	1.55	0.72

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2375:ILE:HG23	1:A:2532:ALA:HA	1.71	0.72
3:C:168:GLU:OE1	3:C:189:ASN:ND2	2.23	0.72
1:A:1022:PHE:O	1:A:1025:SER:OG	2.07	0.72
1:A:1416:LEU:O	1:A:1419:ILE:HG22	1.89	0.72
1:A:990:LEU:HD22	1:A:1030:TYR:HE2	1.55	0.72
2:B:133:LEU:O	2:B:137:LEU:N	2.23	0.72
1:A:1043:VAL:HG23	1:A:1077:HIS:CE1	2.25	0.72
1:A:1163:LEU:HD21	1:A:1198:VAL:HG13	1.70	0.72
1:A:2213:PRO:O	1:A:2217:ARG:N	2.18	0.72
2:B:712:PRO:O	2:B:716:ARG:N	2.23	0.72
1:A:901:VAL:O	1:A:905:MET:N	2.18	0.72
1:A:764:ALA:O	1:A:768:ILE:N	2.23	0.71
1:A:1003:VAL:O	1:A:1007:ALA:N	2.21	0.71
1:A:1887:GLY:O	1:A:1891:SER:N	2.23	0.71
2:B:95:PRO:O	2:B:96:GLN:CB	2.38	0.71
1:A:1436:ALA:O	1:A:1440:PHE:N	2.23	0.71
1:A:877:ASN:O	1:A:880:THR:OG1	2.05	0.71
1:A:894:LEU:HD22	1:A:898:LYS:HZ1	1.64	0.71
1:A:913:SER:O	1:A:1622:ARG:NH1	2.24	0.71
2:B:1149:ILE:O	2:B:1159:GLN:N	2.23	0.71
1:A:2244:ASP:O	1:A:2346:LEU:N	2.22	0.71
2:B:1190:ILE:N	2:B:1220:GLN:O	2.20	0.71
3:C:58:ALA:HA	3:C:67:MET:HA	1.72	0.71
1:A:378:LEU:O	1:A:382:ASN:N	2.24	0.71
1:A:1310:TYR:O	1:A:1314:ALA:N	2.17	0.71
1:A:2419:GLU:HG2	1:A:2501:ILE:HD13	1.73	0.71
1:A:272:VAL:O	1:A:276:SER:N	2.24	0.71
1:A:2340:HIS:HE1	1:A:2342:SER:HB2	1.56	0.71
1:A:281:ARG:CB	1:A:282:LEU:C	2.59	0.71
2:B:495:TRP:C	2:B:497:LYS:H	1.94	0.71
1:A:1177:LEU:HB3	1:A:1209:TYR:CE1	2.26	0.71
1:A:1473:ASP:O	1:A:1476:LEU:N	2.24	0.71
1:A:649:VAL:HA	1:A:652:VAL:HB	1.72	0.71
2:B:201:LEU:HA	2:B:204:LYS:HD2	1.73	0.71
1:A:2340:HIS:N	1:A:2343:ASN:OD1	2.24	0.70
1:A:703:GLN:O	1:A:707:ILE:N	2.24	0.70
1:A:1039:ARG:O	1:A:1077:HIS:NE2	2.24	0.70
1:A:1111:LEU:HA	1:A:1114:LEU:HB2	1.72	0.70
1:A:769:ARG:HH22	1:A:800:ALA:HB1	1.57	0.70
1:A:881:ARG:NH1	1:A:888:LEU:HD21	2.06	0.70
1:A:2172:LEU:N	1:A:2184:PHE:O	2.21	0.70

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:719:SER:O	1:A:722:ASN:N	2.23	0.70
1:A:844:LEU:O	1:A:847:LEU:N	2.25	0.70
2:B:1040:VAL:HA	2:B:1046:ILE:HG23	1.74	0.70
3:C:198:ASN:N	3:C:211:ILE:O	2.22	0.70
1:A:1901:GLN:O	1:A:1905:ARG:HG2	1.92	0.70
1:A:2427:LEU:O	1:A:2430:ARG:NE	2.21	0.70
1:A:1753:LYS:O	1:A:1757:TRP:N	2.17	0.70
1:A:2120:SER:HA	1:A:2161:GLN:HA	1.72	0.70
1:A:2408:ARG:NH1	1:A:2524:GLN:OE1	2.24	0.70
1:A:1672:THR:O	1:A:1676:LEU:N	2.22	0.70
2:B:484:ALA:O	2:B:488:ARG:N	2.25	0.70
2:B:731:THR:O	2:B:735:LEU:N	2.24	0.70
3:C:248:ARG:O	3:C:252:PHE:N	2.22	0.70
1:A:2163:ILE:HB	1:A:2169:PRO:HG2	1.73	0.70
1:A:2341:PRO:HG2	1:A:2549:TRP:CE3	2.27	0.70
1:A:707:ILE:HA	1:A:710:LEU:HD12	1.74	0.70
2:B:1181:ILE:N	2:B:1193:TYR:O	2.24	0.70
1:A:1484:LEU:HD23	1:A:1487:LEU:HD12	1.73	0.70
1:A:1650:MET:HA	1:A:1653:TRP:HD1	1.57	0.70
1:A:2339:ARG:NH1	1:A:2343:ASN:O	2.25	0.70
1:A:1039:ARG:NH1	1:A:1073:GLN:OE1	2.25	0.70
1:A:1404:PHE:HB2	1:A:1412:ILE:HG21	1.74	0.70
2:B:90:PRO:CG	2:B:96:GLN:OE1	2.40	0.70
1:A:1776:TYR:HB2	1:A:1793:TRP:CD1	2.27	0.70
1:A:2075:GLY:HA2	1:A:2078:LEU:HD22	1.74	0.70
1:A:2522:PRO:O	1:A:2526:GLU:N	2.21	0.70
3:C:271:GLY:HA3	3:C:289:SER:HB3	1.74	0.70
1:A:1450:TYR:HB2	1:A:1459:ALA:HB2	1.75	0.69
1:A:1637:LEU:O	1:A:1641:SER:N	2.24	0.69
1:A:2063:GLN:N	1:A:2067:GLU:OE1	2.22	0.69
1:A:1969:PRO:HA	1:A:1972:LEU:HD12	1.73	0.69
1:A:2037:LEU:HB3	1:A:2043:ASN:HB3	1.74	0.69
3:C:183:SER:O	3:C:199:LEU:N	2.24	0.69
3:C:296:LEU:O	3:C:304:ILE:HA	1.92	0.69
3:C:36:ARG:NH2	3:C:69:ASP:O	2.25	0.69
3:C:37:THR:N	3:C:74:ASN:OD1	2.24	0.69
1:A:1673:LEU:HD23	1:A:1676:LEU:HD12	1.74	0.69
1:A:2275:TYR:O	1:A:2283:LYS:NZ	2.24	0.69
1:A:754:ALA:O	1:A:758:GLY:N	2.25	0.69
2:B:89:ASP:HB2	2:B:153:HIS:CA	2.22	0.69
1:A:1419:ILE:O	1:A:1423:LEU:N	2.25	0.69

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1890:ARG:O	1:A:1893:SER:OG	2.10	0.69
3:C:248:ARG:HE	3:C:251:ASN:HD22	1.41	0.69
3:C:279:SER:OG	3:C:281:ASP:OD1	2.09	0.69
1:A:1135:ALA:O	1:A:1138:THR:OG1	2.10	0.69
1:A:1496:GLN:O	1:A:1500:LYS:N	2.23	0.69
1:A:2155:SER:H	1:A:2175:MET:HB3	1.58	0.69
1:A:2105:TYR:O	1:A:2109:ARG:N	2.25	0.69
2:B:1151:ASP:N	2:B:1157:LYS:O	2.18	0.69
3:C:94:HIS:HB2	3:C:101:TYR:CE2	2.28	0.69
1:A:1660:CYS:O	1:A:1663:SER:OG	2.07	0.69
1:A:740:GLU:HA	1:A:743:HIS:CD2	2.27	0.69
2:B:149:HIS:HA	2:B:192:PHE:HB2	1.74	0.69
2:B:426:ASN:HA	2:B:431:GLU:CD	2.13	0.69
1:A:1420:ASN:O	1:A:1425:GLN:N	2.22	0.69
1:A:1994:ILE:HA	1:A:1997:ASN:HB2	1.75	0.69
1:A:717:ARG:HH22	1:A:748:ARG:NH1	1.91	0.69
1:A:875:GLU:HG2	1:A:1618:ILE:HG12	1.75	0.69
1:A:988:GLN:HB2	1:A:989:PHE:HB3	1.75	0.69
1:A:957:ARG:HH11	1:A:992:GLN:HB3	1.58	0.69
3:C:172:SER:O	3:C:190:SER:N	2.21	0.69
3:C:185:MET:N	3:C:197:TRP:O	2.23	0.69
3:C:260:ILE:HD11	3:C:272:TRP:C	2.13	0.69
3:C:28:GLN:CG	3:C:31:SER:HB3	2.23	0.69
3:C:84:VAL:HG21	3:C:88:ILE:HD11	1.75	0.69
1:A:1199:LEU:O	1:A:1203:ARG:N	2.26	0.69
1:A:2083:GLU:O	1:A:2087:LYS:N	2.16	0.69
1:A:2161:GLN:O	1:A:2171:LYS:N	2.26	0.69
1:A:2424:ASP:O	1:A:2428:ASN:N	2.26	0.69
3:C:152:ILE:HD12	3:C:165:LEU:HD23	1.74	0.69
3:C:153:HIS:HD2	3:C:162:ASN:HD21	1.41	0.69
3:C:23:THR:HA	3:C:39:GLN:HA	1.74	0.69
1:A:1132:ARG:HE	1:A:1168:GLU:HB3	1.58	0.69
1:A:575:GLU:O	1:A:579:VAL:N	2.24	0.69
1:A:777:LYS:O	1:A:779:LEU:N	2.23	0.69
1:A:2083:GLU:HG3	1:A:2087:LYS:HE3	1.75	0.68
1:A:692:ASN:O	1:A:696:LEU:HG	1.94	0.68
1:A:863:THR:O	1:A:866:GLU:N	2.26	0.68
1:A:1337:LEU:O	1:A:1341:ILE:N	2.17	0.68
1:A:968:HIS:O	1:A:971:VAL:HG23	1.93	0.68
3:C:154:ILE:N	3:C:163:GLU:O	2.18	0.68
1:A:2152:ARG:HB2	1:A:2177:SER:HB3	1.74	0.68

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:735:ILE:N	1:A:738:LEU:HD12	2.07	0.68
1:A:1020:VAL:HG12	1:A:1024:LYS:HE3	1.75	0.68
1:A:1281:LEU:O	1:A:1285:ARG:N	2.21	0.68
1:A:1297:SER:O	1:A:1301:ARG:N	2.23	0.68
1:A:2172:LEU:O	1:A:2184:PHE:N	2.26	0.68
1:A:1276:SER:O	1:A:1280:TRP:N	2.21	0.68
1:A:1587:TYR:OH	1:A:1628:ARG:NE	2.26	0.68
1:A:281:ARG:CB	1:A:282:LEU:O	2.42	0.68
1:A:542:MET:O	1:A:546:VAL:N	2.27	0.68
1:A:851:THR:HA	1:A:854:VAL:HB	1.75	0.68
3:C:291:ASP:OD2	3:C:295:ARG:NH1	2.27	0.68
1:A:1019:LEU:HA	1:A:1022:PHE:CD2	2.17	0.68
1:A:2339:ARG:NH1	1:A:2356:ILE:O	2.27	0.68
1:A:2274:ASP:OD1	3:C:22:HIS:NE2	2.26	0.68
3:C:279:SER:HB3	3:C:284:TYR:HB2	1.76	0.68
1:A:2076:ARG:HG3	1:A:2077:ASP:H	1.59	0.68
1:A:978:ILE:O	1:A:981:SER:OG	2.08	0.68
2:B:749:GLY:O	2:B:753:ALA:N	2.23	0.68
3:C:104:GLY:HA3	3:C:110:ARG:HH12	1.59	0.68
1:A:1215:ARG:O	1:A:1219:GLY:N	2.27	0.68
1:A:1484:LEU:O	1:A:1489:GLU:N	2.27	0.68
1:A:1788:LYS:O	1:A:1792:ALA:N	2.25	0.68
1:A:690:ALA:HA	1:A:693:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:816:TRP:N	1:A:819:GLU:OE2	2.22	0.68
1:A:1724:MET:O	1:A:1728:ALA:N	2.27	0.68
1:A:1944:ALA:O	1:A:1987:ARG:NH1	2.26	0.68
1:A:2495:LYS:HA	1:A:2498:ILE:HD12	1.75	0.68
1:A:870:ASN:HA	1:A:873:LYS:HD2	1.75	0.68
3:C:22:HIS:HA	3:C:40:HIS:O	1.93	0.68
1:A:1039:ARG:HA	1:A:1042:TRP:CD1	2.29	0.68
1:A:1046:THR:HB	1:A:1049:GLN:H	1.58	0.68
1:A:1066:GLU:N	1:A:1070:TYR:OH	2.22	0.68
1:A:1170:ARG:NE	1:A:1204:ILE:HG12	2.09	0.68
1:A:822:ILE:O	1:A:825:MET:N	2.27	0.68
2:B:1074:GLU:HB3	2:B:1083:LEU:HB2	1.75	0.68
2:B:193:VAL:HG11	2:B:199:ALA:HA	1.76	0.68
1:A:1096:LEU:HD13	1:A:1133:LYS:HD2	1.75	0.67
1:A:1615:ILE:O	1:A:1619:TRP:N	2.19	0.67
1:A:1787:TYR:CD1	1:A:1894:LEU:HB2	2.29	0.67
1:A:659:LEU:N	1:A:660:LEU:HA	2.08	0.67
2:B:84:LEU:N	2:B:116:ARG:O	2.25	0.67

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:155:TRP:HA	3:C:161:HIS:O	1.95	0.67
3:C:67:MET:O	3:C:77:PRO:HA	1.94	0.67
1:A:2053:PRO:HA	1:A:2056:ALA:HB3	1.76	0.67
1:A:957:ARG:NH1	1:A:992:GLN:HB3	2.10	0.67
1:A:988:GLN:CB	1:A:989:PHE:HB3	2.25	0.67
1:A:990:LEU:O	1:A:1030:TYR:OH	2.12	0.67
1:A:1585:ARG:HD2	1:A:1588:GLY:HA3	1.77	0.67
1:A:1892:ILE:HG21	1:A:1930:ILE:HG13	1.75	0.67
2:B:920:SER:HB3	2:B:929:MET:HB2	1.76	0.67
3:C:111:ILE:HD11	3:C:155:TRP:HH2	1.60	0.67
1:A:1631:GLU:N	1:A:1631:GLU:OE1	2.27	0.67
1:A:1974:TYR:O	1:A:1978:VAL:N	2.25	0.67
1:A:2217:ARG:O	1:A:2219:ASN:ND2	2.27	0.67
1:A:736:GLN:O	1:A:739:THR:OG1	2.12	0.67
1:A:781:LEU:HD11	1:A:824:ILE:HD12	1.77	0.67
1:A:865:LEU:HD22	1:A:906:ILE:HB	1.75	0.67
1:A:1057:GLU:HB3	1:A:1101:GLN:HE22	1.60	0.67
1:A:1433:LEU:HD13	1:A:1453:LEU:HD11	1.76	0.67
1:A:1776:TYR:HB2	1:A:1793:TRP:HD1	1.60	0.67
1:A:2426:LEU:O	1:A:2429:TRP:NE1	2.28	0.67
1:A:2504:VAL:O	1:A:2508:LEU:N	2.23	0.67
1:A:714:THR:H	1:A:717:ARG:NH2	1.93	0.67
3:C:284:TYR:HE1	3:C:305:LYS:HZ1	1.50	0.67
3:C:50:VAL:HG22	3:C:57:ILE:HB	1.77	0.67
1:A:1631:GLU:CD	1:A:1631:GLU:H	1.96	0.67
2:B:1160:ASP:OD1	2:B:1161:ILE:N	2.28	0.67
3:C:24:VAL:HB	3:C:38:VAL:HB	1.77	0.67
1:A:1050:SER:HB2	1:A:1090:ARG:NH2	2.10	0.67
1:A:2535:HIS:O	1:A:2539:CYS:N	2.23	0.67
1:A:336:TYR:O	1:A:340:GLN:N	2.20	0.67
2:B:1175:ASP:HB2	2:B:1180:LEU:HB2	1.77	0.67
3:C:93:PHE:HA	3:C:100:MET:HA	1.76	0.67
1:A:1550:LEU:O	1:A:1554:GLN:N	2.25	0.67
1:A:1808:ASN:O	1:A:1812:ASP:N	2.27	0.67
1:A:1930:ILE:HG21	1:A:1935:TRP:HE1	1.60	0.67
1:A:2411:LYS:O	1:A:2415:MET:HG2	1.95	0.67
1:A:623:ALA:HB1	1:A:635:HIS:HE1	1.60	0.67
2:B:89:ASP:CB	2:B:152:GLY:C	2.63	0.67
1:A:1491:GLY:O	1:A:1495:GLN:N	2.16	0.66
1:A:1988:HIS:HD2	1:A:1992:ASN:HD21	1.42	0.66
1:A:2185:LEU:HD13	1:A:2239:TRP:HB2	1.75	0.66

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:513:ASN:O	2:B:517:TYR:N	2.21	0.66
1:A:1363:PHE:O	1:A:1367:SER:N	2.28	0.66
1:A:1952:LEU:HA	1:A:1955:ARG:NH1	2.10	0.66
1:A:338:SER:O	1:A:342:LEU:N	2.29	0.66
1:A:1385:GLU:HB3	1:A:1396:ALA:HB2	1.77	0.66
1:A:857:PRO:O	1:A:861:TYR:OH	2.13	0.66
2:B:1181:ILE:O	2:B:1193:TYR:N	2.21	0.66
3:C:61:GLY:N	3:C:64:HIS:O	2.27	0.66
1:A:1019:LEU:HD23	1:A:1022:PHE:CD2	2.30	0.66
1:A:1060:VAL:HA	1:A:1063:LEU:HD12	1.77	0.66
1:A:1705:TRP:CE3	1:A:1710:LYS:HB2	2.31	0.66
1:A:2201:LEU:HD13	1:A:2417:VAL:HG11	1.77	0.66
1:A:2421:PHE:HA	1:A:2424:ASP:HB2	1.77	0.66
1:A:776:LEU:HD23	1:A:780:ILE:HD12	1.77	0.66
1:A:1143:THR:O	1:A:1183:GLN:NE2	2.28	0.66
1:A:2322:ARG:O	1:A:2325:ALA:N	2.29	0.66
1:A:641:ALA:HA	1:A:642:HIS:ND1	2.11	0.66
1:A:1109:ASP:O	1:A:1111:LEU:N	2.29	0.66
1:A:1417:ILE:HA	1:A:1420:ASN:ND2	2.10	0.66
1:A:1450:TYR:HA	1:A:1453:LEU:HB2	1.78	0.66
1:A:697:PHE:HA	1:A:708:ARG:HD2	1.76	0.66
3:C:242:GLN:HB2	3:C:260:ILE:HG13	1.77	0.66
1:A:716:GLY:O	1:A:718:LEU:N	2.27	0.66
1:A:1743:LEU:O	1:A:1747:MET:N	2.21	0.66
1:A:1776:TYR:HB3	1:A:1793:TRP:HB2	1.78	0.66
1:A:1776:TYR:O	1:A:1780:THR:N	2.20	0.66
3:C:136:LEU:HG	3:C:140:GLN:HA	1.77	0.66
1:A:1140:ASP:O	1:A:1143:THR:OG1	2.14	0.66
1:A:1756:GLU:HA	1:A:1759:LEU:HD12	1.78	0.66
1:A:2005:LEU:HD12	1:A:2137:GLU:HG3	1.77	0.66
1:A:1428:ALA:HB2	1:A:2395:ASN:HD21	1.61	0.66
1:A:960:ARG:NH2	1:A:978:ILE:HG22	2.10	0.66
3:C:192:GLY:O	3:C:219:HIS:N	2.23	0.66
3:C:225:GLN:N	3:C:238:CYS:HB2	2.10	0.66
3:C:46:ASN:HB2	3:C:60:ALA:HB3	1.78	0.66
1:A:1870:THR:O	1:A:1874:SER:N	2.27	0.66
1:A:1873:LEU:O	1:A:1877:LEU:N	2.23	0.66
1:A:865:LEU:HA	1:A:910:ARG:HE	1.61	0.66
2:B:114:GLN:O	2:B:115:PRO:CG	2.23	0.66
2:B:651:LEU:O	2:B:655:GLY:N	2.28	0.66
1:A:1139:VAL:HA	1:A:1142:LEU:HB2	1.79	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1382:LEU:HA	1:A:1385:GLU:HB2	1.78	0.65
1:A:1629:ILE:HG22	1:A:1630:VAL:H	1.61	0.65
1:A:768:ILE:HA	1:A:771:TYR:HD2	1.60	0.65
1:A:833:LEU:HA	1:A:836:LYS:HD2	1.77	0.65
3:C:152:ILE:HB	3:C:165:LEU:HB3	1.77	0.65
3:C:165:LEU:HG	3:C:167:PRO:HD3	1.77	0.65
3:C:168:GLU:HB2	3:C:195:TYR:CE2	2.32	0.65
1:A:1056:ILE:HA	1:A:1059:ILE:HD12	1.78	0.65
1:A:1188:TYR:OH	1:A:1213:ILE:O	2.14	0.65
1:A:2094:VAL:HG12	1:A:2098:THR:HB	1.78	0.65
1:A:2374:LYS:O	1:A:2531:GLN:NE2	2.26	0.65
1:A:917:LEU:O	1:A:918:SER:OG	2.14	0.65
1:A:999:ASN:O	1:A:1003:VAL:N	2.22	0.65
1:A:1752:LEU:HD22	1:A:1786:TRP:CH2	2.32	0.65
1:A:714:THR:HB	1:A:715:VAL:HG23	1.79	0.65
1:A:714:THR:N	1:A:717:ARG:HH21	1.94	0.65
3:C:132:ASN:ND2	3:C:172:SER:OG	2.29	0.65
3:C:88:ILE:HA	3:C:104:GLY:HA2	1.78	0.65
1:A:1050:SER:HA	1:A:1053:ILE:HD12	1.77	0.65
1:A:1302:SER:HA	1:A:1305:ALA:HB3	1.79	0.65
1:A:1646:PRO:HA	1:A:1653:TRP:HE1	1.60	0.65
1:A:2382:MET:O	1:A:2386:ALA:N	2.29	0.65
1:A:1427:GLU:HG3	1:A:2395:ASN:OD1	1.97	0.65
1:A:2311:GLU:HG2	1:A:2312:VAL:H	1.61	0.65
1:A:2332:TYR:OH	1:A:2503:ARG:NH2	2.29	0.65
1:A:577:SER:O	1:A:581:SER:N	2.25	0.65
1:A:727:MET:HG3	1:A:760:LEU:HD13	1.78	0.65
1:A:777:LYS:HD2	1:A:821:PHE:CD2	2.32	0.65
2:B:352:LEU:HB3	2:B:353:ALA:HB3	1.78	0.65
1:A:1067:PHE:HB3	1:A:1069:LEU:H	1.61	0.65
1:A:1744:HIS:O	1:A:1748:ALA:N	2.23	0.65
1:A:1789:ALA:HA	1:A:1792:ALA:HB3	1.78	0.65
1:A:846:GLN:O	1:A:850:SER:N	2.25	0.65
3:C:25:ARG:HD3	3:C:310:GLY:HA3	1.78	0.65
1:A:1283:TRP:O	1:A:1287:LEU:N	2.19	0.65
1:A:2132:MET:O	1:A:2134:ARG:HG2	1.96	0.65
1:A:2502:ASN:O	1:A:2506:ASP:N	2.20	0.65
1:A:829:GLN:O	1:A:832:SER:OG	2.14	0.65
1:A:954:ALA:O	1:A:992:GLN:NE2	2.29	0.65
3:C:226:CYS:HB2	3:C:235:LEU:HD11	1.79	0.65
1:A:1049:GLN:O	1:A:1053:ILE:N	2.22	0.65

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:900:LYS:O	1:A:903:ILE:N	2.29	0.65
2:B:422:MET:CG	2:B:434:PRO:CG	2.74	0.65
2:B:422:MET:O	2:B:425:GLU:HB3	1.96	0.65
2:B:904:GLY:HA2	2:B:918:PRO:HA	1.78	0.65
3:C:111:ILE:HD11	3:C:155:TRP:CH2	2.32	0.65
3:C:219:HIS:CE1	3:C:239:SER:HB2	2.32	0.65
1:A:604:ARG:HD3	1:A:616:LYS:HD3	1.79	0.65
1:A:1011:PHE:O	1:A:1015:GLN:N	2.21	0.65
1:A:1054:LEU:HD11	1:A:1090:ARG:NH1	2.12	0.65
1:A:1434:GLU:HA	1:A:1437:MET:SD	2.37	0.65
1:A:1597:SER:O	1:A:1601:GLU:HG3	1.97	0.65
1:A:905:MET:O	1:A:1568:ARG:NH2	2.30	0.65
2:B:750:GLY:HA2	2:B:753:ALA:HB3	1.78	0.65
3:C:174:THR:N	3:C:188:VAL:O	2.30	0.65
1:A:1306:LEU:O	1:A:1310:TYR:N	2.29	0.64
1:A:2057:MET:O	1:A:2060:ARG:HG2	1.98	0.64
1:A:668:ASP:HA	1:A:671:ILE:HB	1.79	0.64
1:A:721:MET:HB3	1:A:725:PHE:CE2	2.32	0.64
3:C:227:ARG:N	3:C:236:ALA:O	2.30	0.64
3:C:31:SER:O	3:C:306:ARG:NH1	2.30	0.64
1:A:1770:PRO:O	1:A:1774:GLN:N	2.21	0.64
1:A:893:ALA:O	1:A:896:PRO:HD2	1.97	0.64
3:C:224:LEU:HD11	3:C:272:TRP:HE3	1.61	0.64
1:A:1419:ILE:HA	1:A:1422:LYS:HB2	1.78	0.64
1:A:1531:GLU:O	1:A:1535:MET:HG3	1.97	0.64
1:A:1533:THR:HA	1:A:1536:ILE:HD12	1.79	0.64
1:A:908:GLN:HE22	1:A:1568:ARG:C	2.01	0.64
1:A:2327:MET:HG3	1:A:2355:HIS:CD2	2.32	0.64
3:C:20:TYR:HD2	3:C:313:LYS:HD2	1.62	0.64
3:C:65:ILE:O	3:C:80:SER:HA	1.98	0.64
1:A:1302:SER:O	1:A:1306:LEU:N	2.27	0.64
1:A:1982:SER:OG	1:A:1984:THR:O	2.13	0.64
1:A:2038:TYR:HB2	1:A:2047:MET:SD	2.38	0.64
1:A:2427:LEU:HB3	1:A:2430:ARG:NE	2.12	0.64
1:A:736:GLN:CD	1:A:782:LYS:HG2	2.18	0.64
3:C:106:ASP:OD2	3:C:108:THR:OG1	2.16	0.64
1:A:1329:LEU:O	1:A:1332:ASP:N	2.31	0.64
2:B:347:PHE:HA	2:B:350:PHE:CG	2.33	0.64
3:C:64:HIS:HD2	3:C:66:ARG:HG3	1.62	0.64
1:A:1333:GLN:O	1:A:1337:LEU:N	2.18	0.64
1:A:1967:TYR:HB2	1:A:1968:HIS:CE1	2.32	0.64

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:600:THR:O	1:A:604:ARG:N	2.30	0.64
1:A:594:PHE:CZ	1:A:628:ARG:HD3	2.32	0.64
1:A:973:GLN:HB3	1:A:977:PHE:HE2	1.63	0.64
3:C:14:ILE:O	3:C:320:PHE:HA	1.98	0.64
3:C:65:ILE:HB	3:C:81:TYR:CD2	2.33	0.64
1:A:1804:TYR:HA	1:A:1807:GLN:HB3	1.80	0.64
1:A:2017:ILE:HG12	1:A:2230:LEU:HB3	1.78	0.64
1:A:2198:VAL:O	1:A:2201:LEU:HB3	1.98	0.64
1:A:2311:GLU:HA	1:A:2314:PHE:HB3	1.80	0.64
1:A:973:GLN:O	1:A:976:THR:OG1	2.11	0.64
1:A:993:VAL:O	1:A:996:THR:OG1	2.10	0.64
3:C:100:MET:HB3	3:C:112:TRP:HB2	1.80	0.64
3:C:195:TYR:HA	3:C:215:LYS:HA	1.80	0.64
1:A:2178:ASN:ND2	1:A:2180:HIS:HD2	1.96	0.64
2:B:1087:ALA:HA	2:B:1093:ILE:HA	1.79	0.64
1:A:1040:GLU:O	1:A:1044:MET:N	2.28	0.64
1:A:1159:ILE:HG12	1:A:1177:LEU:HD21	1.80	0.64
1:A:1155:ILE:HB	1:A:1187:LYS:NZ	2.13	0.64
1:A:1412:ILE:O	1:A:1416:LEU:N	2.31	0.64
1:A:1654:LEU:O	1:A:1658:SER:N	2.19	0.64
1:A:2111:ILE:HA	1:A:2114:GLN:HB2	1.80	0.64
1:A:2115:LEU:HB3	1:A:2168:ARG:HH22	1.63	0.64
1:A:601:GLN:NE2	1:A:641:ALA:O	2.31	0.64
1:A:832:SER:HB2	1:A:836:LYS:HE3	1.81	0.64
1:A:861:TYR:HD2	1:A:898:LYS:HZ3	1.42	0.64
1:A:1666:LEU:O	1:A:1670:HIS:N	2.18	0.63
1:A:1976:LEU:O	1:A:1980:SER:N	2.30	0.63
1:A:2242:HIS:HA	1:A:2348:ARG:NH1	2.13	0.63
1:A:791:ASN:HA	1:A:797:ASN:ND2	2.13	0.63
3:C:131:ILE:HG23	3:C:145:VAL:HG13	1.80	0.63
3:C:147:ASP:OD1	3:C:151:ALA:N	2.28	0.63
1:A:1021:SER:HA	1:A:1024:LYS:CD	2.27	0.63
1:A:1657:ALA:O	1:A:1661:GLY:N	2.24	0.63
1:A:730:LEU:HG	1:A:742:GLU:OE1	1.99	0.63
2:B:789:ARG:N	2:B:803:SER:O	2.32	0.63
1:A:1103:PHE:CD1	1:A:1140:ASP:HB3	2.33	0.63
1:A:1747:MET:O	1:A:1751:PHE:N	2.26	0.63
1:A:817:VAL:HG12	1:A:818:ASP:H	1.63	0.63
2:B:1127:MET:N	2:B:1141:SER:O	2.31	0.63
1:A:1885:VAL:HA	1:A:1888:PHE:HD2	1.64	0.63
1:A:845:GLY:O	1:A:849:ALA:N	2.23	0.63

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:106:LEU:O	2:B:110:TYR:N	2.26	0.63
2:B:203:VAL:HA	2:B:206:PHE:CD2	2.32	0.63
1:A:1128:PRO:O	1:A:1131:SER:OG	2.15	0.63
1:A:1190:ILE:HB	1:A:1191:PHE:CD2	2.33	0.63
1:A:1575:LEU:O	1:A:1578:MET:N	2.22	0.63
1:A:1988:HIS:CD2	1:A:1992:ASN:HD21	2.17	0.63
1:A:2008:GLN:HA	1:A:2011:MET:HB3	1.80	0.63
1:A:2425:PRO:HA	1:A:2428:ASN:HD22	1.64	0.63
1:A:746:ILE:HG23	1:A:749:ILE:HB	1.81	0.63
3:C:262:SER:HB3	3:C:270:ARG:NH1	2.14	0.63
3:C:36:ARG:HH11	3:C:74:ASN:H	1.45	0.63
1:A:1569:ASP:O	1:A:1572:ASP:HB2	1.99	0.63
1:A:1649:ASP:HB3	1:A:1653:TRP:HE1	1.63	0.63
1:A:2285:GLU:O	1:A:2289:HIS:N	2.24	0.63
1:A:582:ILE:O	1:A:586:LEU:N	2.26	0.63
1:A:777:LYS:NZ	1:A:821:PHE:HB2	2.14	0.63
2:B:920:SER:O	2:B:929:MET:N	2.24	0.63
3:C:285:ILE:HB	3:C:299:VAL:HG22	1.81	0.63
1:A:1514:ARG:HA	1:A:1536:ILE:HD11	1.81	0.63
1:A:1628:ARG:HB2	1:A:1633:TRP:HE1	1.64	0.63
1:A:273:ARG:O	1:A:277:MET:N	2.32	0.63
2:B:1149:ILE:N	2:B:1160:ASP:O	2.31	0.63
3:C:111:ILE:O	3:C:122:GLN:N	2.32	0.63
1:A:1046:THR:C	1:A:1048:ILE:HA	2.19	0.63
1:A:729:PHE:HA	1:A:732:LYS:HG3	1.80	0.63
1:A:777:LYS:C	1:A:779:LEU:H	2.03	0.63
2:B:146:VAL:O	2:B:190:SER:N	2.32	0.63
2:B:96:GLN:HB3	2:B:99:LEU:HB3	1.81	0.63
1:A:573:LEU:O	1:A:575:GLU:N	2.28	0.63
1:A:624:ARG:HH12	1:A:639:GLY:HA3	1.64	0.63
1:A:767:LEU:HD22	1:A:1112:HIS:HE1	92.13	0.62
1:A:1138:THR:O	1:A:1142:LEU:N	2.27	0.62
1:A:1938:VAL:HG12	1:A:1941:GLN:HB2	1.81	0.62
2:B:1145:ARG:HB3	2:B:1165:ALA:O	1.99	0.62
2:B:148:PHE:N	2:B:190:SER:O	2.31	0.62
1:A:1345:LEU:O	1:A:1349:ASP:N	2.32	0.62
1:A:2526:GLU:O	1:A:2530:LYS:HG2	1.99	0.62
1:A:865:LEU:HB3	1:A:906:ILE:HG21	1.81	0.62
2:B:89:ASP:CB	2:B:153:HIS:HA	2.29	0.62
1:A:1562:GLN:O	1:A:1566:LYS:NZ	2.28	0.62
1:A:788:PRO:HA	1:A:791:ASN:ND2	2.15	0.62

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:1240:ASP:HA	2:B:1249:VAL:HA	1.81	0.62
2:B:422:MET:CG	2:B:434:PRO:CD	2.77	0.62
3:C:41:GLN:H	3:C:66:ARG:CZ	2.13	0.62
1:A:1015:GLN:O	1:A:1019:LEU:N	2.22	0.62
1:A:1148:PHE:HZ	1:A:1180:LEU:O	1.82	0.62
1:A:973:GLN:HG3	1:A:1011:PHE:CE1	2.34	0.62
3:C:185:MET:HB2	3:C:199:LEU:HD11	1.82	0.62
1:A:1012:LEU:O	1:A:1016:LEU:N	2.30	0.62
1:A:1132:ARG:HG2	1:A:1172:THR:HG21	1.82	0.62
1:A:2280:LEU:O	1:A:2284:VAL:N	2.28	0.62
1:A:1042:TRP:CH2	1:A:1059:ILE:HG21	2.35	0.62
1:A:1487:LEU:O	1:A:1665:ARG:NH1	2.32	0.62
1:A:2344:LEU:HB2	1:A:2354:LEU:O	2.00	0.62
1:A:763:ASN:O	1:A:767:LEU:N	2.32	0.62
1:A:853:TYR:O	1:A:856:GLU:N	2.22	0.62
1:A:1659:LEU:HD23	1:A:1662:LYS:HD3	1.81	0.62
1:A:909:SER:O	1:A:913:SER:N	2.31	0.62
3:C:90:SER:O	3:C:103:GLY:N	2.33	0.62
1:A:1067:PHE:HB2	1:A:1070:TYR:CD1	2.35	0.62
1:A:1110:TYR:H	1:A:1112:HIS:CD2	2.18	0.62
1:A:1212:LEU:HD23	1:A:1215:ARG:HD2	1.82	0.62
1:A:1578:MET:O	1:A:1581:GLU:N	2.32	0.62
1:A:2501:ILE:HG22	1:A:2505:ARG:NH1	2.15	0.62
1:A:747:GLY:HA2	1:A:750:LYS:NZ	2.15	0.62
1:A:865:LEU:HD13	1:A:906:ILE:HD12	1.81	0.62
3:C:21:ASP:HA	3:C:313:LYS:HG3	1.82	0.62
3:C:297:TRP:CE3	3:C:304:ILE:HG13	2.34	0.62
1:A:1378:ASN:HA	1:A:1381:VAL:HB	1.80	0.62
1:A:1681:PRO:HG2	1:A:1683:ARG:HB2	1.82	0.62
1:A:699:ALA:O	1:A:701:ASN:ND2	2.33	0.62
1:A:1020:VAL:O	1:A:1024:LYS:N	2.25	0.62
1:A:1181:VAL:HB	1:A:1212:LEU:HD13	1.82	0.62
1:A:1977:THR:O	1:A:1980:SER:OG	2.08	0.62
3:C:152:ILE:O	3:C:164:GLN:HA	2.00	0.62
3:C:279:SER:O	3:C:282:SER:N	2.28	0.62
1:A:1609:PRO:C	1:A:1611:ARG:H	2.03	0.61
1:A:2505:ARG:HA	1:A:2508:LEU:HB2	1.82	0.61
1:A:706:GLU:O	1:A:709:GLU:HB2	2.00	0.61
1:A:1009:ARG:HA	1:A:1012:LEU:HD12	1.82	0.61
1:A:1028:ARG:HG3	1:A:1029:PRO:HA	1.83	0.61
1:A:1445:ILE:O	1:A:1449:TRP:HD1	1.84	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:817:VAL:H	1:A:819:GLU:HG3	1.64	0.61
1:A:1211:VAL:HG12	1:A:1215:ARG:NE	2.15	0.61
1:A:1623:LEU:HD21	1:A:1633:TRP:CE2	2.36	0.61
1:A:1679:VAL:HG21	1:A:1690:PRO:HG3	1.82	0.61
1:A:859:ARG:HA	1:A:861:TYR:CE1	2.35	0.61
3:C:221:ARG:HB2	3:C:241:ASP:HB3	1.82	0.61
3:C:44:GLN:NE2	3:C:46:ASN:OD1	2.34	0.61
3:C:59:ALA:O	3:C:66:ARG:N	2.33	0.61
1:A:1119:VAL:O	1:A:1161:ARG:NH1	2.34	0.61
1:A:1341:ILE:O	1:A:1345:LEU:N	2.30	0.61
1:A:237:THR:O	1:A:241:ALA:N	2.30	0.61
1:A:270:GLU:O	1:A:274:ILE:N	2.30	0.61
1:A:806:ALA:O	1:A:809:SER:OG	2.17	0.61
3:C:28:GLN:HG2	3:C:31:SER:HB3	1.82	0.61
1:A:1424:GLN:NE2	1:A:1584:SER:OG	2.34	0.61
1:A:2218:LYS:O	1:A:2322:ARG:NH1	2.33	0.61
3:C:285:ILE:O	3:C:297:TRP:N	2.23	0.61
1:A:1631:GLU:O	1:A:1634:GLN:HB2	2.01	0.61
1:A:1724:MET:HB3	1:A:1743:LEU:HD21	1.82	0.61
1:A:2172:LEU:HD23	1:A:2184:PHE:HB2	1.83	0.61
1:A:353:LYS:O	1:A:355:THR:N	2.33	0.61
1:A:761:VAL:O	1:A:765:PRO:HD2	2.01	0.61
1:A:1915:HIS:HB3	1:A:1950:ARG:HB3	1.82	0.61
1:A:339:HIS:HA	1:A:342:LEU:CB	2.31	0.61
1:A:604:ARG:NH1	1:A:616:LYS:HB3	2.16	0.61
2:B:120:LYS:HD2	2:B:123:LEU:HD11	1.83	0.61
2:B:217:LEU:HD13	2:B:257:ASP:N	2.15	0.61
3:C:173:ILE:HD13	3:C:187:ALA:HB1	1.82	0.61
1:A:1378:ASN:O	1:A:1382:LEU:HG	2.01	0.61
1:A:1878:LEU:HA	1:A:1881:THR:HB	1.82	0.61
1:A:2052:GLU:O	1:A:2056:ALA:N	2.24	0.61
1:A:2083:GLU:HG3	1:A:2087:LYS:HG3	1.83	0.61
1:A:2372:PRO:HB2	1:A:2374:LYS:HE2	1.83	0.61
1:A:977:PHE:O	1:A:980:LYS:HB3	2.01	0.61
1:A:1138:THR:C	1:A:1142:LEU:HG	2.21	0.61
1:A:1338:ILE:O	1:A:1342:GLU:N	2.22	0.61
1:A:2526:GLU:OE2	1:A:2530:LYS:HD3	2.00	0.61
1:A:668:ASP:OD1	1:A:671:ILE:HD12	2.01	0.61
1:A:765:PRO:O	1:A:769:ARG:N	2.29	0.61
2:B:782:GLU:OE2	2:B:1222:ARG:NH1	2.30	0.61
1:A:1132:ARG:O	1:A:1136:LEU:HG	2.01	0.61

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1139:VAL:HG13	1:A:1179:SER:HB3	1.82	0.61
1:A:1783:ASP:OD2	1:A:1786:TRP:HB2	2.01	0.61
1:A:1892:ILE:HA	1:A:1895:SER:HB2	1.82	0.61
1:A:811:LEU:HD11	1:A:829:GLN:HE22	1.66	0.61
2:B:901:LEU:N	2:B:921:HIS:O	2.28	0.61
3:C:239:SER:N	3:C:273:MET:O	2.32	0.61
1:A:2364:VAL:HA	1:A:2367:THR:HB	1.82	0.60
1:A:709:GLU:OE1	1:A:741:LEU:HD12	2.01	0.60
1:A:921:LYS:HE3	1:A:1627:GLN:NE2	2.16	0.60
1:A:1110:TYR:O	1:A:1113:LEU:N	2.34	0.60
1:A:1969:PRO:HG2	1:A:1970:GLN:HE21	1.67	0.60
1:A:2430:ARG:O	1:A:2434:THR:N	2.25	0.60
1:A:639:GLY:N	1:A:640:HIS:O	2.35	0.60
1:A:701:ASN:O	1:A:705:PHE:N	2.28	0.60
1:A:791:ASN:HA	1:A:797:ASN:HD21	1.66	0.60
2:B:197:SER:O	2:B:199:ALA:N	2.34	0.60
1:A:1016:LEU:O	1:A:1020:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:1054:LEU:HD11	1:A:1090:ARG:HH12	1.67	0.60
1:A:1517:ALA:HA	1:A:1529:MET:HG3	1.83	0.60
1:A:1559:LEU:O	1:A:1563:CYS:N	2.33	0.60
1:A:1747:MET:HA	1:A:1750:CYS:HB2	1.82	0.60
1:A:1792:ALA:O	1:A:1796:MET:N	2.26	0.60
1:A:2008:GLN:HB3	1:A:2136:LEU:HD23	1.83	0.60
1:A:779:LEU:O	1:A:783:LEU:N	2.34	0.60
1:A:1189:GLN:HA	1:A:1192:ILE:HG13	1.83	0.60
1:A:1541:HIS:CE1	1:A:1592:SER:HB3	2.37	0.60
1:A:1684:GLN:HB3	1:A:1686:ASP:H	1.67	0.60
1:A:1712:ASP:HA	1:A:1715:GLN:HB3	1.83	0.60
1:A:1755:GLY:O	1:A:1759:LEU:HG	2.01	0.60
1:A:2055:HIS:O	1:A:2059:GLU:N	2.34	0.60
1:A:2407:LEU:O	1:A:2411:LYS:N	2.35	0.60
1:A:628:ARG:HD2	1:A:635:HIS:NE2	2.16	0.60
2:B:1086:THR:O	2:B:1094:ARG:N	2.29	0.60
3:C:130:PRO:HG2	3:C:148:GLN:CB	2.31	0.60
3:C:132:ASN:ND2	3:C:173:ILE:O	2.34	0.60
3:C:46:ASN:ND2	3:C:87:ASN:OD1	2.27	0.60
1:A:1080:ARG:HA	1:A:1083:MET:HG2	1.82	0.60
1:A:341:GLY:O	1:A:345:PHE:N	2.35	0.60
1:A:346:GLY:O	1:A:349:PRO:N	2.34	0.60
1:A:771:TYR:HB2	1:A:783:LEU:HD21	1.83	0.60
1:A:921:LYS:O	1:A:925:ASP:N	2.35	0.60

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:398:GLU:O	2:B:402:ALA:N	2.35	0.60
1:A:1212:LEU:HA	1:A:1215:ARG:HD2	1.84	0.60
1:A:1657:ALA:HA	1:A:1660:CYS:HB2	1.84	0.60
1:A:2300:ALA:HA	1:A:2303:LEU:HD12	1.83	0.60
2:B:596:VAL:O	2:B:600:ALA:N	2.32	0.60
3:C:290:SER:HA	3:C:314:ALA:HB1	1.83	0.60
1:A:1020:VAL:O	1:A:1024:LYS:HG3	2.02	0.60
1:A:1564:ILE:O	1:A:1568:ARG:N	2.24	0.60
1:A:2052:GLU:HA	1:A:2055:HIS:HD2	1.66	0.60
1:A:632:PRO:HA	1:A:635:HIS:HB2	1.83	0.60
3:C:14:ILE:HD13	3:C:70:LEU:HD13	1.83	0.60
1:A:1181:VAL:HG11	1:A:1212:LEU:HB3	1.84	0.60
1:A:1766:GLU:OE1	1:A:1804:TYR:OH	2.13	0.60
1:A:2340:HIS:O	1:A:2343:ASN:N	2.31	0.60
1:A:2223:GLN:HE21	1:A:2352:LYS:HD3	1.67	0.60
1:A:581:SER:O	1:A:585:ALA:N	2.34	0.60
1:A:976:THR:HA	1:A:979:PHE:CD2	2.37	0.60
3:C:244:CYS:N	3:C:258:LEU:O	2.30	0.60
1:A:1020:VAL:HG13	1:A:1062:ALA:HB2	1.84	0.60
1:A:1170:ARG:HG2	1:A:1202:HIS:CD2	2.37	0.60
1:A:1383:LEU:HA	1:A:1386:ARG:HB2	1.83	0.60
1:A:2214:THR:HA	1:A:2217:ARG:HB2	1.83	0.60
1:A:2310:SER:OG	1:A:2311:GLU:OE1	2.18	0.60
1:A:889:GLY:O	1:A:893:ALA:N	2.25	0.60
2:B:788:ARG:HA	2:B:804:PHE:HA	1.84	0.60
3:C:229:SER:OG	3:C:233:THR:N	2.35	0.60
1:A:961:ASP:HA	1:A:964:LEU:HD12	1.84	0.60
1:A:975:ILE:O	1:A:978:ILE:N	2.35	0.60
1:A:2081:ALA:HB3	1:A:2104:TYR:CE1	2.37	0.59
2:B:1140:SER:OG	2:B:1150:TRP:NE1	2.34	0.59
1:A:1450:TYR:HB3	1:A:1455:GLU:O	2.02	0.59
1:A:1910:TRP:CZ2	1:A:1956:LEU:HB3	2.37	0.59
1:A:636:LEU:HB2	1:A:672:ARG:NH1	2.17	0.59
1:A:736:GLN:HB2	1:A:782:LYS:HE2	1.84	0.59
2:B:590:SER:O	2:B:594:CYS:N	2.35	0.59
3:C:123:ARG:NH2	3:C:160:ASP:OD1	2.36	0.59
1:A:774:PRO:HA	1:A:1079:LEU:CD2	63.48	0.59
1:A:1941:GLN:HG3	1:A:2197:ARG:NE	2.06	0.59
1:A:623:ALA:HB1	1:A:635:HIS:CE1	2.37	0.59
1:A:746:ILE:O	1:A:750:LYS:HG3	2.02	0.59
1:A:785:ASP:O	1:A:788:PRO:HD2	2.02	0.59

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:972:VAL:O	1:A:976:THR:HG23	2.02	0.59
1:A:802:ILE:HD12	2:B:370:LEU:HA	80.83	0.59
2:B:612:ILE:O	2:B:616:ARG:N	2.29	0.59
3:C:67:MET:HB2	3:C:79:ILE:H	1.67	0.59
1:A:1070:TYR:O	1:A:1074:LEU:HG	2.02	0.59
1:A:1605:TYR:N	1:A:1606:LYS:O	2.36	0.59
1:A:2052:GLU:HA	1:A:2055:HIS:CD2	2.38	0.59
1:A:2302:LEU:HD12	1:A:2303:LEU:N	2.16	0.59
2:B:1057:LEU:HB2	2:B:1104:LYS:HE2	1.84	0.59
3:C:219:HIS:NE2	3:C:239:SER:HB2	2.17	0.59
3:C:262:SER:HB3	3:C:270:ARG:CZ	2.33	0.59
1:A:1433:LEU:HA	1:A:1436:ALA:HB3	1.85	0.59
1:A:952:MET:O	1:A:956:MET:HG2	2.03	0.59
1:A:988:GLN:CG	1:A:989:PHE:HB3	2.33	0.59
3:C:32:GLY:N	3:C:306:ARG:HD3	2.16	0.59
1:A:1045:ASN:HB3	1:A:1046:THR:HG23	1.85	0.59
1:A:1566:LYS:O	1:A:1570:LEU:HG	2.03	0.59
1:A:1969:PRO:HB2	1:A:1973:ILE:HG23	1.85	0.59
1:A:2252:ASP:HA	1:A:2255:GLU:OE2	2.03	0.59
2:B:392:GLN:O	2:B:395:THR:N	2.36	0.59
3:C:127:VAL:HG21	3:C:131:ILE:HG12	1.85	0.59
3:C:238:CYS:SG	3:C:275:GLY:HA2	2.42	0.59
1:A:1138:THR:OG1	1:A:1139:VAL:N	2.35	0.59
1:A:1596:LEU:O	1:A:1600:GLU:HG3	2.03	0.59
1:A:2246:LEU:HB2	1:A:2346:LEU:HD11	1.84	0.59
1:A:2285:GLU:OE2	3:C:290:SER:OG	2.20	0.59
1:A:417:MET:O	1:A:421:LEU:N	2.32	0.59
1:A:599:LEU:HA	1:A:602:PHE:HB2	1.85	0.59
2:B:778:ILE:O	2:B:1251:GLN:N	2.32	0.59
1:A:1571:LEU:HG	1:A:1575:LEU:HD23	1.84	0.59
1:A:1745:LYS:HG2	1:A:1783:ASP:CG	2.24	0.59
1:A:2152:ARG:O	1:A:2177:SER:N	2.32	0.59
2:B:349:ASN:O	2:B:353:ALA:HB3	2.03	0.59
2:B:539:LEU:O	2:B:543:VAL:N	2.36	0.59
3:C:269:SER:O	3:C:271:GLY:N	2.36	0.59
1:A:908:GLN:NE2	1:A:1572:ASP:OD1	2.36	0.59
1:A:1602:VAL:O	1:A:1605:TYR:N	2.35	0.59
1:A:747:GLY:HA2	1:A:750:LYS:HD2	1.85	0.59
2:B:213:ARG:HA	2:B:217:LEU:HD21	1.85	0.59
2:B:809:THR:O	2:B:882:SER:N	2.36	0.59
1:A:1130:PRO:O	1:A:1134:ALA:N	2.36	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1142:LEU:HD22	1:A:1180:LEU:HD21	1.85	0.58
1:A:1210:ASP:HA	1:A:1213:ILE:HD12	1.84	0.58
1:A:1737:GLN:O	1:A:1741:GLN:N	2.31	0.58
1:A:1787:TYR:HD1	1:A:1894:LEU:HB2	1.67	0.58
1:A:793:GLY:O	1:A:797:ASN:ND2	2.36	0.58
1:A:966:HIS:HB3	1:A:968:HIS:NE2	2.18	0.58
2:B:426:ASN:HA	2:B:431:GLU:OE2	2.02	0.58
3:C:242:GLN:HE21	3:C:261:LYS:HA	1.68	0.58
1:A:1092:VAL:HG11	1:A:1130:PRO:HB3	1.85	0.58
1:A:1450:TYR:O	1:A:1454:HIS:N	2.36	0.58
1:A:2321:THR:O	1:A:2324:LEU:HB3	2.03	0.58
1:A:701:ASN:CB	1:A:704:VAL:HB	2.31	0.58
1:A:775:ILE:HG22	1:A:776:LEU:N	2.18	0.58
1:A:855:VAL:HG22	1:A:864:LEU:HD13	1.84	0.58
1:A:1068:LYS:HB3	2:B:429:PRO:HD3	1.85	0.58
2:B:432:GLN:O	2:B:434:PRO:HD3	2.03	0.58
1:A:755:ARG:HH12	2:B:482:SER:C	135.27	0.58
3:C:272:TRP:HB2	3:C:274:TRP:NE1	2.18	0.58
3:C:64:HIS:HA	3:C:81:TYR:O	2.02	0.58
1:A:1206:HIS:HB3	1:A:1207:GLN:CG	2.33	0.58
1:A:2189:HIS:CA	1:A:2233:ASN:HB3	2.30	0.58
1:A:2311:GLU:HG2	1:A:2312:VAL:N	2.18	0.58
1:A:609:HIS:HB2	1:A:612:ASN:H	1.68	0.58
2:B:1141:SER:HA	2:B:1147:VAL:HG13	1.84	0.58
2:B:201:LEU:O	2:B:205:SER:N	2.30	0.58
2:B:800:ILE:O	2:B:811:ILE:HA	2.03	0.58
1:A:1382:LEU:O	1:A:1386:ARG:HG3	2.03	0.58
1:A:1695:GLN:O	1:A:1699:ALA:N	2.36	0.58
1:A:2345:MET:O	1:A:2354:LEU:N	2.27	0.58
1:A:747:GLY:HA2	1:A:750:LYS:HZ3	1.67	0.58
2:B:781:PHE:HB3	2:B:1249:VAL:HB	1.85	0.58
1:A:1119:VAL:HA	1:A:1122:PHE:HD2	1.68	0.58
1:A:1644:VAL:HG12	1:A:1645:SER:O	2.04	0.58
1:A:1967:TYR:HB2	1:A:1968:HIS:ND1	2.19	0.58
1:A:2205:VAL:HA	1:A:2208:LEU:HD12	1.85	0.58
3:C:229:SER:N	3:C:234:LEU:O	2.31	0.58
1:A:2162:VAL:HG22	1:A:2170:ARG:HG2	1.85	0.58
2:B:1169:VAL:HA	2:B:1185:LEU:HA	1.86	0.58
3:C:274:TRP:CD1	3:C:289:SER:HA	2.38	0.58
1:A:1028:ARG:O	1:A:1030:TYR:N	2.37	0.58
1:A:1163:LEU:HD21	1:A:1198:VAL:CG1	2.33	0.58

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1717:MET:HB3	1:A:1754:LEU:HD21	1.86	0.58
1:A:1906:VAL:O	1:A:1910:TRP:N	2.23	0.58
1:A:2004:THR:OG1	1:A:2137:GLU:OE2	2.17	0.58
1:A:704:VAL:O	1:A:708:ARG:NH1	2.37	0.58
2:B:397:ILE:O	2:B:401:THR:N	2.34	0.58
2:B:531:HIS:O	2:B:535:THR:N	2.34	0.58
3:C:143:LEU:N	3:C:155:TRP:O	2.37	0.58
3:C:29:ALA:HB1	3:C:296:LEU:HD22	1.86	0.58
1:A:1190:ILE:HB	1:A:1191:PHE:CG	2.38	0.58
1:A:1346:THR:O	1:A:1350:ILE:N	2.37	0.58
1:A:1533:THR:O	1:A:1547:ARG:NH2	2.37	0.58
1:A:1628:ARG:CB	1:A:1633:TRP:HE1	2.17	0.58
1:A:2044:VAL:HG11	1:A:2088:TYR:CE2	2.39	0.58
1:A:2344:LEU:HA	1:A:2356:ILE:HG12	1.84	0.58
1:A:2526:GLU:HA	1:A:2529:ILE:HD12	1.86	0.58
1:A:611:LEU:HB3	1:A:615:HIS:CD2	2.39	0.58
1:A:717:ARG:NH2	1:A:748:ARG:NH1	2.51	0.58
1:A:811:LEU:O	1:A:814:ARG:NE	2.37	0.58
1:A:633:SER:O	1:A:672:ARG:NH2	2.37	0.58
1:A:784:LYS:HB3	1:A:824:ILE:HG22	1.86	0.58
1:A:1018:MET:O	1:A:1021:SER:OG	2.17	0.58
1:A:1096:LEU:HA	1:A:1099:ALA:HB3	1.85	0.58
1:A:1409:THR:O	1:A:1413:LEU:HG	2.04	0.58
1:A:1742:GLU:HG3	1:A:1745:LYS:HD2	1.86	0.58
2:B:89:ASP:CG	2:B:153:HIS:CB	2.72	0.58
1:A:1581:GLU:OE2	1:A:1584:SER:N	2.35	0.57
1:A:1869:VAL:O	1:A:1873:LEU:N	2.29	0.57
1:A:2332:TYR:O	1:A:2507:LYS:NZ	2.34	0.57
1:A:2393:ASP:OD1	1:A:2397:ARG:NH1	2.33	0.57
3:C:27:TRP:CD2	3:C:308:TYR:HB3	2.39	0.57
1:A:1070:TYR:O	1:A:1074:LEU:N	2.37	0.57
1:A:1258:LEU:O	1:A:1262:THR:N	2.33	0.57
1:A:2123:LEU:HG	1:A:2131:LEU:HB2	1.85	0.57
1:A:2174:LEU:O	1:A:2182:PHE:N	2.29	0.57
1:A:2338:ASP:OD2	1:A:2343:ASN:ND2	2.38	0.57
1:A:781:LEU:O	1:A:784:LYS:N	2.37	0.57
1:A:973:GLN:O	1:A:976:THR:N	2.37	0.57
1:A:1209:TYR:CE2	1:A:1213:ILE:HD11	2.39	0.57
1:A:1719:HIS:O	1:A:1722:GLN:HB2	2.03	0.57
1:A:2250:ILE:O	1:A:2253:TYR:HB3	2.05	0.57
1:A:2304:TRP:HA	1:A:2313:TRP:CD1	2.39	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:373:VAL:O	1:A:377:VAL:N	2.34	0.57
2:B:671:VAL:O	2:B:675:GLU:N	2.35	0.57
1:A:1217:VAL:HA	1:A:1220:TYR:HD2	1.70	0.57
1:A:1390:CYS:C	1:A:1393:TYR:H	2.08	0.57
1:A:1378:ASN:ND2	1:A:1403:GLU:HG3	2.20	0.57
1:A:2249:LEU:HA	1:A:2252:ASP:HB2	1.86	0.57
2:B:1194:ASP:N	2:B:1215:VAL:O	2.36	0.57
3:C:200:THR:HB	3:C:209:GLN:H	1.68	0.57
3:C:57:ILE:O	3:C:68:TYR:N	2.25	0.57
1:A:993:VAL:HB	1:A:1030:TYR:OH	2.04	0.57
1:A:1172:THR:O	1:A:1176:THR:HG23	2.05	0.57
1:A:2141:PRO:HB2	1:A:2184:PHE:HE2	1.70	0.57
1:A:2154:GLN:HB3	1:A:2175:MET:HG3	1.87	0.57
1:A:1659:LEU:HA	1:A:1662:LYS:HB2	1.87	0.57
1:A:2018:ARG:NH1	1:A:2067:GLU:OE2	2.38	0.57
1:A:2366:MET:HA	1:A:2372:PRO:HB3	1.86	0.57
1:A:781:LEU:HD12	1:A:821:PHE:HB3	1.87	0.57
1:A:781:LEU:HD13	1:A:821:PHE:HD1	1.69	0.57
2:B:1091:GLY:O	2:B:1120:PRO:HA	2.05	0.57
1:A:1031:MET:O	1:A:1033:GLU:N	2.38	0.57
1:A:2339:ARG:NH2	1:A:2355:HIS:HB3	2.18	0.57
1:A:2197:ARG:NH1	1:A:2424:ASP:OD2	2.38	0.57
1:A:765:PRO:HA	1:A:768:ILE:HB	1.87	0.57
3:C:137:HIS:HE1	3:C:203:ILE:HD13	1.69	0.57
3:C:63:GLN:N	3:C:86:LYS:O	2.38	0.57
1:A:1100:ILE:O	1:A:1103:PHE:N	2.37	0.57
1:A:1119:VAL:HA	1:A:1122:PHE:CD2	2.40	0.57
1:A:1174:MET:HE1	1:A:1208:ARG:N	2.19	0.57
1:A:2024:HIS:CD2	1:A:2025:GLU:HG3	2.40	0.57
1:A:2115:LEU:O	1:A:2117:GLN:N	2.36	0.57
2:B:1190:ILE:HB	2:B:1220:GLN:HB2	1.87	0.57
2:B:195:ASP:OD2	2:B:199:ALA:N	2.38	0.57
3:C:132:ASN:N	3:C:146:GLY:O	2.27	0.57
1:A:1052:ILE:HG12	1:A:1055:LEU:HD12	1.87	0.57
1:A:1973:ILE:HG13	1:A:1974:TYR:H	1.70	0.57
1:A:2140:VAL:N	1:A:2151:ILE:O	2.37	0.57
2:B:89:ASP:HB3	2:B:153:HIS:HA	1.85	0.57
3:C:14:ILE:HG21	3:C:70:LEU:HD22	1.87	0.57
3:C:224:LEU:HD13	3:C:274:TRP:CE3	2.40	0.57
1:A:1019:LEU:O	1:A:1023:VAL:HG23	2.05	0.57
1:A:1095:LYS:O	1:A:1099:ALA:N	2.26	0.57

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1092:VAL:HG12	1:A:1096:LEU:HG	1.87	0.57
1:A:1581:GLU:HG2	1:A:1584:SER:CB	2.31	0.57
1:A:1643:VAL:HG22	1:A:1644:VAL:HG23	1.86	0.57
1:A:1936:LEU:HA	1:A:1939:ILE:HG13	1.87	0.57
1:A:1988:HIS:HA	1:A:1991:ALA:HB3	1.87	0.57
1:A:2038:TYR:O	1:A:2042:ARG:HD3	2.05	0.57
1:A:2285:GLU:HA	1:A:2288:GLU:OE1	2.05	0.57
1:A:1431:GLY:HA3	1:A:2394:GLY:HA2	1.87	0.57
1:A:2427:LEU:HB3	1:A:2430:ARG:CZ	2.35	0.57
1:A:2526:GLU:O	1:A:2530:LYS:N	2.29	0.57
1:A:948:PRO:O	1:A:952:MET:HG2	2.04	0.57
1:A:960:ARG:HH22	1:A:982:LEU:HG	1.70	0.57
1:A:1115:LEU:HD12	1:A:1151:TYR:CG	2.40	0.56
1:A:1742:GLU:O	1:A:1746:LEU:N	2.35	0.56
1:A:1871:GLU:HA	1:A:1874:SER:CB	2.35	0.56
1:A:1982:SER:HB3	1:A:1988:HIS:ND1	2.20	0.56
1:A:238:PHE:HA	1:A:241:ALA:HB3	1.87	0.56
1:A:817:VAL:HG12	1:A:818:ASP:N	2.20	0.56
1:A:919:GLU:H	1:A:1627:GLN:HB2	1.70	0.56
1:A:1769:ILE:HD13	1:A:1804:TYR:CE2	2.40	0.56
1:A:1900:LEU:HD12	1:A:1903:THR:HB	1.87	0.56
1:A:2290:ALA:O	1:A:2294:THR:HG23	2.05	0.56
1:A:755:ARG:HH22	2:B:483:SER:N	135.07	0.56
1:A:768:ILE:HG23	1:A:783:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:944:ASP:OD2	1:A:1368:ASP:HA	2.05	0.56
2:B:165:TRP:HB3	2:B:213:ARG:CZ	2.35	0.56
1:A:1211:VAL:O	1:A:1215:ARG:HG3	2.06	0.56
1:A:1218:LYS:O	1:A:1222:LEU:N	2.38	0.56
1:A:1586:ALA:O	1:A:1590:MET:HG2	2.05	0.56
1:A:1597:SER:HA	1:A:1600:GLU:OE1	2.04	0.56
1:A:1738:GLN:HA	1:A:1741:GLN:HB3	1.87	0.56
1:A:2010:MET:O	1:A:2014:GLU:N	2.33	0.56
1:A:2141:PRO:HD3	1:A:2153:ILE:HD11	1.87	0.56
1:A:2231:SER:OG	1:A:2234:SER:N	2.39	0.56
1:A:655:VAL:HA	1:A:658:LYS:HB2	1.87	0.56
1:A:775:ILE:HG22	1:A:776:LEU:H	1.70	0.56
1:A:923:SER:O	1:A:927:SER:N	2.38	0.56
2:B:352:LEU:HB3	2:B:353:ALA:CB	2.36	0.56
2:B:537:PHE:O	2:B:540:ALA:N	2.38	0.56
3:C:128:ASN:H	3:C:153:HIS:CE1	2.24	0.56
3:C:260:ILE:HD13	3:C:287:THR:HG21	1.87	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1463:TYR:O	1:A:1467:MET:N	2.24	0.56
1:A:1484:LEU:HA	1:A:1487:LEU:HB2	1.86	0.56
1:A:1564:ILE:HG22	1:A:1568:ARG:HG3	1.88	0.56
1:A:1655:LYS:O	1:A:1659:LEU:HG	2.05	0.56
1:A:1715:GLN:OE1	1:A:1719:HIS:NE2	2.39	0.56
1:A:2269:LEU:HD22	1:A:2273:PRO:HA	1.87	0.56
3:C:108:THR:HG22	3:C:126:GLN:HG3	1.88	0.56
3:C:151:ALA:CB	3:C:164:GLN:HE21	2.19	0.56
1:A:1938:VAL:O	1:A:1942:LEU:HG	2.05	0.56
1:A:2253:TYR:OH	1:A:2301:LYS:HD3	2.06	0.56
1:A:2299:LEU:HD23	1:A:2386:ALA:HB2	1.87	0.56
1:A:2380:THR:OG1	1:A:2547:PRO:O	2.19	0.56
2:B:1168:CYS:O	2:B:1186:GLY:N	2.36	0.56
3:C:239:SER:O	3:C:272:TRP:HB3	2.06	0.56
3:C:239:SER:H	3:C:273:MET:HB3	1.71	0.56
3:C:69:ASP:H	3:C:75:PRO:HG3	1.70	0.56
1:A:1881:THR:O	1:A:1884:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:2214:THR:HG22	1:A:2218:LYS:HE2	1.87	0.56
1:A:2501:ILE:HG22	1:A:2505:ARG:HH12	1.71	0.56
1:A:688:ALA:HA	1:A:691:GLU:CD	2.26	0.56
1:A:771:TYR:HD1	1:A:1113:LEU:HD21	77.20	0.56
1:A:960:ARG:HD3	1:A:979:PHE:CE1	2.41	0.56
3:C:239:SER:N	3:C:273:MET:HB3	2.21	0.56
1:A:1135:ALA:HB1	1:A:1176:THR:HG21	1.88	0.56
1:A:1752:LEU:HD22	1:A:1786:TRP:HH2	1.71	0.56
1:A:1985:THR:OG1	1:A:1989:ASN:OD1	2.24	0.56
1:A:249:LEU:O	1:A:253:LYS:N	2.39	0.56
1:A:1716:HIS:HA	1:A:1719:HIS:HD2	1.71	0.56
1:A:612:ASN:O	1:A:616:LYS:HG3	2.06	0.56
1:A:755:ARG:NH2	2:B:482:SER:N	132.71	0.56
1:A:1191:PHE:N	1:A:1193:PRO:HD2	2.21	0.56
1:A:2097:LEU:O	1:A:2100:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:712:ILE:HG23	1:A:715:VAL:H	1.71	0.56
1:A:837:ARG:HH12	1:A:1611:ARG:C	2.08	0.56
2:B:161:ASN:HB2	2:B:209:PHE:CZ	2.41	0.56
2:B:457:LEU:O	2:B:460:GLY:N	2.39	0.56
3:C:289:SER:HB2	3:C:291:ASP:CG	2.26	0.56
1:A:1693:HIS:HB2	1:A:1696:VAL:HB	1.88	0.56
1:A:1717:MET:O	1:A:1721:VAL:N	2.22	0.56
1:A:1933:ASP:HA	1:A:1936:LEU:HD12	1.88	0.56
3:C:101:TYR:CE1	3:C:111:ILE:HG23	2.41	0.56

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:94:HIS:N	3:C:99:TRP:O	2.39	0.56
1:A:1016:LEU:HD22	1:A:1042:TRP:CZ3	2.41	0.56
1:A:1028:ARG:O	1:A:1031:MET:HG2	2.06	0.56
1:A:1389:LYS:O	1:A:1393:TYR:N	2.39	0.56
1:A:1473:ASP:HB3	1:A:1475:GLU:OE1	2.06	0.56
1:A:1728:ALA:O	1:A:1732:ILE:HG13	2.06	0.56
1:A:2128:PRO:O	1:A:2132:MET:N	2.39	0.56
1:A:2511:ARG:HG2	1:A:2515:HIS:HA	1.87	0.56
1:A:329:ALA:HA	1:A:330:LEU:C	2.26	0.56
3:C:101:TYR:HE1	3:C:111:ILE:HG23	1.71	0.56
3:C:298:CYS:H	3:C:303:GLU:H	1.53	0.56
1:A:2098:THR:HA	1:A:2101:TRP:HD1	1.71	0.55
1:A:2535:HIS:HA	1:A:2538:LEU:HB2	1.88	0.55
1:A:359:SER:O	1:A:362:CYS:N	2.39	0.55
1:A:582:ILE:HA	1:A:585:ALA:HB3	1.88	0.55
1:A:1132:ARG:NE	1:A:1168:GLU:HB3	2.21	0.55
1:A:1434:GLU:O	1:A:1437:MET:HB2	2.06	0.55
1:A:1501:TRP:CH2	1:A:1509:GLN:HA	2.42	0.55
1:A:1807:GLN:O	1:A:1811:ARG:HG2	2.05	0.55
1:A:2130:LEU:HA	1:A:2133:CYS:SG	2.47	0.55
1:A:2005:LEU:N	1:A:2137:GLU:OE2	2.39	0.55
1:A:2511:ARG:HA	1:A:2517:ASP:O	2.06	0.55
1:A:600:THR:C	1:A:604:ARG:HG3	2.27	0.55
1:A:768:ILE:HA	1:A:771:TYR:CE2	2.40	0.55
1:A:784:LYS:HZ3	1:A:821:PHE:C	2.10	0.55
1:A:972:VAL:CG1	1:A:975:ILE:HB	2.37	0.55
1:A:1108:ASP:CG	1:A:1146:LEU:HD12	2.27	0.55
1:A:1433:LEU:O	1:A:1437:MET:N	2.29	0.55
1:A:1716:HIS:HA	1:A:1719:HIS:CD2	2.42	0.55
1:A:957:ARG:NH1	1:A:993:VAL:HG23	2.22	0.55
1:A:975:ILE:HA	1:A:978:ILE:HB	1.89	0.55
1:A:1719:HIS:HA	1:A:1722:GLN:OE1	2.07	0.55
1:A:1973:ILE:O	1:A:1977:THR:N	2.26	0.55
1:A:936:VAL:O	1:A:940:ASN:N	2.39	0.55
2:B:1152:THR:HA	2:B:1156:MET:HA	1.88	0.55
2:B:793:TYR:CG	2:B:800:ILE:HG22	2.41	0.55
1:A:1450:TYR:HD1	1:A:1453:LEU:HD12	1.72	0.55
1:A:1594:HIS:O	1:A:1598:GLU:HG2	2.07	0.55
1:A:1669:ALA:O	1:A:1673:LEU:N	2.32	0.55
1:A:1041:PHE:HA	1:A:1044:MET:CB	2.37	0.55
1:A:1391:ARG:O	1:A:1396:ALA:N	2.39	0.55

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:907:ASP:O	1:A:911:ASP:N	2.32	0.55
2:B:142:LYS:C	2:B:143:GLU:O	2.45	0.55
3:C:20:TYR:O	3:C:22:HIS:N	2.40	0.55
1:A:1042:TRP:CE3	1:A:1056:ILE:HG12	2.42	0.55
1:A:1110:TYR:O	1:A:1114:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:1350:ILE:N	1:A:1351:ALA:HA	2.21	0.55
1:A:1532:TYR:O	1:A:1536:ILE:N	2.39	0.55
1:A:1649:ASP:HB3	1:A:1653:TRP:NE1	2.21	0.55
1:A:1985:THR:HG23	1:A:1989:ASN:HD21	1.72	0.55
1:A:2212:ASP:HB3	1:A:2215:SER:HB2	1.89	0.55
1:A:891:LEU:O	1:A:894:LEU:N	2.40	0.55
2:B:957:THR:N	2:B:1036:PRO:O	2.39	0.55
2:B:654:ASP:O	2:B:658:MET:N	2.37	0.55
3:C:292:ASN:O	3:C:311:HIS:HB2	2.06	0.55
1:A:2082:GLN:HE21	1:A:2086:ARG:HH12	1.55	0.55
1:A:2163:ILE:N	1:A:2169:PRO:O	2.40	0.55
3:C:189:ASN:CG	3:C:193:ASN:H	2.10	0.55
3:C:195:TYR:HB3	3:C:197:TRP:HE1	1.72	0.55
1:A:1096:LEU:HD21	1:A:1130:PRO:HA	1.88	0.55
1:A:2152:ARG:N	1:A:2177:SER:OG	2.39	0.55
1:A:660:LEU:O	1:A:661:VAL:HG23	2.07	0.55
1:A:723:PRO:HA	1:A:726:VAL:HB	1.88	0.55
1:A:732:LYS:HD3	1:A:734:LEU:O	2.07	0.55
3:C:89:ALA:H	3:C:104:GLY:HA2	1.71	0.55
1:A:1798:PHE:O	1:A:1802:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:1787:TYR:HA	1:A:1894:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:2048:PHE:CE1	1:A:2085:CYS:HB3	2.42	0.55
1:A:2100:ALA:HA	1:A:2103:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:2512:ASP:OD1	1:A:2512:ASP:N	2.40	0.55
1:A:920:SER:O	1:A:923:SER:OG	2.21	0.55
1:A:957:ARG:O	1:A:960:ARG:HB2	2.07	0.55
2:B:1037:CYS:SG	2:B:1051:TRP:HB3	2.47	0.55
3:C:139:ASN:HD22	3:C:203:ILE:HG23	1.72	0.55
3:C:28:GLN:HG3	3:C:31:SER:HB3	1.89	0.55
3:C:297:TRP:CD2	3:C:304:ILE:HG13	2.42	0.55
3:C:52:PRO:O	3:C:323:SER:OG	2.25	0.55
3:C:69:ASP:HB3	3:C:72:SER:OG	2.07	0.55
1:A:1057:GLU:HB3	1:A:1101:GLN:NE2	2.21	0.54
1:A:1359:ASN:C	1:A:1391:ARG:HH22	2.11	0.54
1:A:1562:GLN:HA	1:A:1565:ASP:CG	2.28	0.54
1:A:2105:TYR:HA	1:A:2108:PHE:HB3	1.89	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2140:VAL:HG11	1:A:2182:PHE:CD2	2.42	0.54
1:A:2317:ARG:NH1	1:A:2388:GLU:HA	2.22	0.54
1:A:836:LYS:O	1:A:837:ARG:O	2.25	0.54
1:A:934:MET:O	1:A:937:ASN:N	2.40	0.54
3:C:286:VAL:HA	3:C:295:ARG:O	2.08	0.54
1:A:1002:ARG:HA	1:A:1005:ASP:HB2	1.88	0.54
1:A:1207:GLN:O	1:A:1211:VAL:N	2.34	0.54
1:A:1501:TRP:CD2	1:A:1532:TYR:HE1	2.26	0.54
1:A:1786:TRP:HZ3	1:A:1789:ALA:H	1.55	0.54
1:A:1959:GLN:O	1:A:1963:ASP:N	2.38	0.54
1:A:2406:VAL:HG12	1:A:2410:HIS:HD2	1.72	0.54
1:A:2506:ASP:O	1:A:2512:ASP:N	2.40	0.54
1:A:751:GLU:OE2	1:A:793:GLY:HA2	2.07	0.54
1:A:878:GLN:HG2	1:A:915:VAL:HG22	1.89	0.54
1:A:976:THR:HA	1:A:979:PHE:HD2	1.72	0.54
2:B:792:SER:O	2:B:801:GLY:N	2.39	0.54
3:C:176:ALA:HA	3:C:187:ALA:HA	1.89	0.54
3:C:271:GLY:HA2	3:C:290:SER:H	1.72	0.54
3:C:95:GLU:H	3:C:140:GLN:HE21	1.54	0.54
1:A:1000:VAL:HG11	1:A:1019:LEU:HD21	1.90	0.54
1:A:1932:ILE:HD13	1:A:1968:HIS:HE1	1.72	0.54
1:A:353:LYS:C	1:A:355:THR:H	2.11	0.54
1:A:604:ARG:HD3	1:A:616:LYS:CD	2.37	0.54
1:A:697:PHE:CE1	1:A:708:ARG:HG3	2.42	0.54
2:B:1232:VAL:HA	2:B:1239:PHE:CD1	2.42	0.54
1:A:1103:PHE:O	1:A:1106:ASN:ND2	2.40	0.54
1:A:1111:LEU:HD23	1:A:1114:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:1558:SER:O	1:A:1561:GLN:HB3	2.08	0.54
1:A:1697:THR:O	1:A:1701:MET:HG3	2.07	0.54
1:A:1700:TYR:CE2	1:A:1704:MET:HB2	2.42	0.54
1:A:894:LEU:O	1:A:897:TYR:N	2.40	0.54
1:A:968:HIS:H	1:A:971:VAL:HG22	1.71	0.54
1:A:732:LYS:O	1:A:1154:ARG:HG3	97.61	0.54
1:A:1369:LYS:N	1:A:1370:GLY:HA3	2.22	0.54
1:A:2246:LEU:HA	1:A:2249:LEU:HD12	1.89	0.54
1:A:771:TYR:C	1:A:774:PRO:HD2	2.28	0.54
1:A:857:PRO:HB2	1:A:858:TYR:CD2	2.43	0.54
1:A:935:LEU:HA	1:A:938:MET:HB2	1.90	0.54
2:B:515:HIS:O	2:B:519:LEU:N	2.38	0.54
2:B:903:SER:N	2:B:919:HIS:O	2.40	0.54
3:C:143:LEU:O	3:C:155:TRP:N	2.29	0.54

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:288:ALA:HB2	3:C:318:LEU:HG	1.90	0.54
1:A:1385:GLU:O	1:A:1392:ALA:HB1	2.08	0.54
1:A:1618:ILE:O	1:A:1622:ARG:N	2.24	0.54
1:A:1771:LYS:HA	1:A:1774:GLN:HB3	1.90	0.54
1:A:2075:GLY:HA2	1:A:2078:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:547:LEU:O	1:A:551:PRO:N	2.41	0.54
1:A:655:VAL:HA	1:A:658:LYS:HD2	1.88	0.54
1:A:657:SER:O	1:A:660:LEU:HD22	2.08	0.54
1:A:697:PHE:HA	1:A:708:ARG:HH11	1.73	0.54
1:A:769:ARG:HH22	1:A:800:ALA:CB	2.21	0.54
1:A:957:ARG:HD2	1:A:992:GLN:CG	2.38	0.54
3:C:177:HIS:ND1	3:C:227:ARG:HA	2.23	0.54
1:A:1420:ASN:HB2	1:A:1429:ALA:HB2	1.90	0.54
1:A:1633:TRP:O	1:A:1637:LEU:N	2.28	0.54
1:A:636:LEU:HB3	1:A:672:ARG:HD3	1.89	0.54
2:B:1130:ASP:H	2:B:1139:MET:HB3	1.72	0.54
1:A:1158:PRO:HA	1:A:1161:ARG:HG3	1.89	0.54
1:A:1413:LEU:HA	1:A:1416:LEU:HB3	1.90	0.54
1:A:1500:LYS:HD3	1:A:1503:LEU:HD12	1.90	0.54
1:A:920:SER:N	1:A:1627:GLN:OE1	2.39	0.54
1:A:2023:TRP:CE3	1:A:2058:MET:HG2	2.43	0.54
1:A:2115:LEU:HB3	1:A:2168:ARG:NH2	2.22	0.54
1:A:2140:VAL:O	1:A:2143:THR:OG1	2.21	0.54
3:C:100:MET:HG2	3:C:102:THR:HG23	1.90	0.54
1:A:1050:SER:HB2	1:A:1090:ARG:HH21	1.73	0.54
1:A:1152:ALA:HA	1:A:1187:LYS:HZ2	1.73	0.54
1:A:1513:ALA:O	1:A:1517:ALA:N	2.23	0.54
1:A:2027:TRP:CE2	1:A:2078:LEU:HD23	2.43	0.54
1:A:763:ASN:O	1:A:767:LEU:HG	2.08	0.54
2:B:1232:VAL:HG23	2:B:1239:PHE:CZ	2.42	0.54
3:C:284:TYR:HA	3:C:298:CYS:HA	1.90	0.54
3:C:50:VAL:HA	3:C:57:ILE:HA	1.90	0.54
1:A:1569:ASP:HA	1:A:1572:ASP:OD2	2.08	0.54
1:A:2038:TYR:O	1:A:2042:ARG:HA	2.08	0.54
1:A:2048:PHE:HE1	1:A:2085:CYS:HB3	1.73	0.54
1:A:1941:GLN:CG	1:A:2197:ARG:HE	2.09	0.54
1:A:2265:HIS:CE1	1:A:2269:LEU:HG	2.43	0.54
3:C:151:ALA:HA	3:C:166:ILE:HG12	1.90	0.54
1:A:1067:PHE:HB2	1:A:1070:TYR:CZ	2.43	0.53
1:A:1459:ALA:HA	1:A:1462:ALA:HB3	1.90	0.53
1:A:1749:ARG:O	1:A:1753:LYS:N	2.32	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1933:ASP:HA	1:A:1936:LEU:HB2	1.90	0.53
1:A:947:TYR:HB2	1:A:950:VAL:HG23	1.89	0.53
2:B:1148:ARG:HB3	2:B:1158:VAL:HG23	1.90	0.53
2:B:416:PHE:HA	2:B:419:TRP:CG	2.43	0.53
1:A:1077:HIS:O	1:A:1080:ARG:N	2.41	0.53
1:A:1092:VAL:HG11	1:A:1130:PRO:CG	2.38	0.53
1:A:1446:GLN:HA	1:A:1449:TRP:HB2	1.90	0.53
1:A:1513:ALA:HA	1:A:1516:ALA:HB3	1.90	0.53
1:A:1718:GLN:HA	1:A:1721:VAL:HB	1.91	0.53
1:A:2057:MET:HA	1:A:2060:ARG:NH1	2.24	0.53
1:A:2325:ALA:O	1:A:2328:SER:HB2	2.08	0.53
1:A:2402:THR:O	1:A:2405:GLU:HB3	2.09	0.53
1:A:2535:HIS:HA	1:A:2538:LEU:HD12	1.90	0.53
2:B:195:ASP:OD2	2:B:202:ILE:HD12	2.08	0.53
3:C:13:VAL:HG13	3:C:320:PHE:CE1	2.44	0.53
3:C:15:LEU:HD23	3:C:308:TYR:CE2	2.43	0.53
1:A:1092:VAL:HG11	1:A:1130:PRO:HG3	1.91	0.53
1:A:1170:ARG:O	1:A:1174:MET:N	2.29	0.53
1:A:1619:TRP:O	1:A:1623:LEU:N	2.26	0.53
1:A:2193:ARG:NH1	1:A:2426:LEU:HB3	2.24	0.53
1:A:2419:GLU:HA	1:A:2422:VAL:HB	1.91	0.53
1:A:628:ARG:O	1:A:632:PRO:HD3	2.08	0.53
1:A:697:PHE:HA	1:A:708:ARG:NH1	2.24	0.53
2:B:1230:VAL:HA	2:B:1241:PRO:HA	1.91	0.53
3:C:89:ALA:HB2	3:C:105:GLU:HG2	1.90	0.53
3:C:135:CYS:SG	3:C:144:ILE:HB	2.49	0.53
1:A:1069:LEU:HA	1:A:1072:PRO:HD2	1.91	0.53
1:A:1117:PRO:O	1:A:1121:LEU:HG	2.09	0.53
1:A:1605:TYR:HD1	1:A:1615:ILE:HD12	1.72	0.53
1:A:1670:HIS:HA	1:A:1673:LEU:HD12	1.90	0.53
1:A:2254:ARG:O	1:A:2258:LYS:N	2.42	0.53
1:A:747:GLY:HA3	1:A:792:PRO:HB2	1.91	0.53
1:A:830:ASP:OD1	1:A:867:VAL:HG22	2.09	0.53
1:A:972:VAL:O	1:A:972:VAL:HG12	2.08	0.53
3:C:17:THR:HG22	3:C:311:HIS:CE1	2.43	0.53
1:A:1001:ILE:HG12	1:A:1038:MET:SD	2.49	0.53
1:A:1115:LEU:HA	1:A:1118:ILE:HD12	1.91	0.53
1:A:1136:LEU:O	1:A:1139:VAL:N	2.41	0.53
1:A:1617:GLN:O	1:A:1621:GLU:N	2.31	0.53
1:A:1684:GLN:HB2	1:A:1687:HIS:CD2	2.44	0.53
1:A:1797:ASN:CB	1:A:1884:ALA:HB2	2.32	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1911:PHE:CE2	1:A:1945:ARG:HD2	2.44	0.53
1:A:1985:THR:HA	1:A:1988:HIS:CE1	2.43	0.53
2:B:447:LEU:O	2:B:450:LEU:N	2.37	0.53
2:B:790:ALA:O	2:B:803:SER:N	2.40	0.53
3:C:153:HIS:CD2	3:C:162:ASN:HD21	2.25	0.53
3:C:20:TYR:HB2	3:C:313:LYS:HB3	1.91	0.53
1:A:1334:GLN:O	1:A:1338:ILE:N	2.27	0.53
1:A:1704:MET:HE3	1:A:1713:ALA:N	2.23	0.53
1:A:1870:THR:HA	1:A:1873:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:2135:ASP:OD1	1:A:2154:GLN:HG3	2.09	0.53
1:A:2209:LEU:HD13	1:A:2220:LEU:HB2	1.90	0.53
1:A:560:GLY:O	1:A:564:GLN:N	2.42	0.53
1:A:754:ALA:HB1	1:A:758:GLY:HA3	1.91	0.53
1:A:960:ARG:NH2	1:A:982:LEU:HG	2.23	0.53
1:A:1050:SER:O	1:A:1053:ILE:HB	2.09	0.53
1:A:1633:TRP:HA	1:A:1636:ILE:HD12	1.91	0.53
1:A:733:MET:SD	1:A:739:THR:HG21	2.49	0.53
1:A:717:ARG:NH1	1:A:748:ARG:HD2	2.22	0.53
1:A:841:LEU:HA	1:A:844:LEU:HD11	1.91	0.53
2:B:131:LYS:HA	2:B:134:CYS:SG	2.49	0.53
1:A:1390:CYS:HA	1:A:1393:TYR:CD2	2.44	0.53
1:A:1566:LYS:O	1:A:1570:LEU:N	2.36	0.53
1:A:1584:SER:O	1:A:1586:ALA:N	2.42	0.53
1:A:1920:ASN:HB2	1:A:1952:LEU:HD23	1.91	0.53
1:A:976:THR:HA	1:A:979:PHE:HB2	1.91	0.53
3:C:189:ASN:ND2	3:C:193:ASN:H	2.07	0.53
3:C:269:SER:C	3:C:271:GLY:H	2.11	0.53
3:C:301:THR:HB	3:C:303:GLU:HG2	1.90	0.53
3:C:57:ILE:N	3:C:68:TYR:O	2.39	0.53
1:A:1163:LEU:CD2	1:A:1202:HIS:HB2	2.38	0.53
1:A:1613:GLU:HA	1:A:1616:ARG:NH1	2.24	0.53
1:A:1703:ASN:O	1:A:1707:SER:N	2.41	0.53
1:A:1891:SER:O	1:A:1894:LEU:N	2.42	0.53
1:A:1993:LYS:O	1:A:1996:LYS:HB3	2.09	0.53
1:A:2340:HIS:HB3	1:A:2545:TRP:CG	2.44	0.53
1:A:704:VAL:O	1:A:708:ARG:HG2	2.09	0.53
1:A:757:LEU:O	1:A:761:VAL:N	2.36	0.53
1:A:750:LYS:HD3	1:A:793:GLY:HA3	1.91	0.53
2:B:791:SER:HA	2:B:802:VAL:HA	1.91	0.53
3:C:41:GLN:H	3:C:66:ARG:NH1	2.07	0.53
1:A:1185:GLY:O	1:A:1188:TYR:HB3	2.09	0.53

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1342:GLU:O	1:A:1346:THR:N	2.32	0.53
1:A:1754:LEU:O	1:A:1758:GLN:N	2.31	0.53
1:A:1784:ARG:HD3	1:A:1790:TRP:HZ2	1.74	0.53
1:A:740:GLU:CA	1:A:743:HIS:HD2	2.21	0.53
1:A:779:LEU:HA	1:A:782:LYS:HB2	1.90	0.53
2:B:205:SER:O	2:B:209:PHE:N	2.37	0.53
2:B:919:HIS:HA	2:B:931:ASP:HA	1.90	0.53
1:A:2523:THR:HG22	1:A:2527:LEU:HG	1.90	0.52
1:A:706:GLU:O	1:A:710:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:918:SER:HB2	1:A:921:LYS:HD2	1.91	0.52
1:A:970:MET:HB3	1:A:972:VAL:N	2.22	0.52
1:A:971:VAL:O	1:A:971:VAL:HG12	2.09	0.52
1:A:1571:LEU:HD11	1:A:1589:ALA:HB1	1.92	0.52
1:A:668:ASP:O	1:A:672:ARG:N	2.26	0.52
1:A:744:SER:C	1:A:747:GLY:H	2.13	0.52
2:B:156:PRO:O	2:B:158:PRO:CD	2.46	0.52
1:A:755:ARG:HH22	2:B:482:SER:N	133.53	0.52
3:C:152:ILE:N	3:C:165:LEU:O	2.29	0.52
3:C:213:LYS:HD3	3:C:252:PHE:HE2	1.75	0.52
3:C:15:LEU:HD11	3:C:286:VAL:HG11	1.91	0.52
1:A:1512:MET:O	1:A:1516:ALA:N	2.25	0.52
1:A:1521:TRP:CZ2	1:A:1642:LEU:HD21	2.45	0.52
1:A:1532:TYR:O	1:A:1536:ILE:HG13	2.10	0.52
1:A:1939:ILE:HA	1:A:1942:LEU:HD12	1.91	0.52
1:A:830:ASP:O	1:A:833:LEU:N	2.43	0.52
1:A:943:LEU:CD2	1:A:951:SER:HB2	2.40	0.52
3:C:21:ASP:HB3	3:C:311:HIS:HD2	1.74	0.52
3:C:237:THR:O	3:C:244:CYS:HA	2.10	0.52
3:C:276:CYS:HB2	3:C:285:ILE:HD11	1.92	0.52
1:A:1472:ASP:OD1	1:A:1476:LEU:HB2	2.09	0.52
1:A:1630:VAL:HG13	1:A:1656:TYR:CE1	2.45	0.52
1:A:1691:THR:HG23	1:A:1720:PHE:HE1	1.74	0.52
1:A:2013:SER:HA	1:A:2016:LEU:HD12	1.92	0.52
1:A:2086:ARG:HA	1:A:2089:MET:HG3	1.91	0.52
1:A:2223:GLN:NE2	1:A:2352:LYS:HD3	2.24	0.52
1:A:578:ASP:HA	1:A:582:ILE:H	1.75	0.52
1:A:596:GLY:O	1:A:600:THR:N	2.34	0.52
1:A:743:HIS:HB2	1:A:789:ASP:HB3	1.91	0.52
1:A:814:ARG:HB3	1:A:815:LYS:HA	1.92	0.52
3:C:130:PRO:HG2	3:C:148:GLN:HB2	1.91	0.52
3:C:54:ARG:HD2	3:C:323:SER:H	1.74	0.52

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1078:MET:HB3	1:A:1110:TYR:CZ	2.45	0.52
1:A:1691:THR:HG23	1:A:1720:PHE:CE1	2.45	0.52
1:A:1999:CYS:O	1:A:2003:ASN:HB2	2.10	0.52
1:A:2082:GLN:NE2	1:A:2086:ARG:HH12	2.07	0.52
1:A:2541:CYS:HB2	1:A:2547:PRO:HG3	1.91	0.52
1:A:746:ILE:O	1:A:749:ILE:N	2.43	0.52
1:A:1009:ARG:O	1:A:1012:LEU:HB2	2.10	0.52
1:A:1060:VAL:HA	1:A:1063:LEU:HB2	1.92	0.52
1:A:1107:LEU:HD23	1:A:1145:SER:OG	2.10	0.52
1:A:1207:GLN:O	1:A:1211:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:1415:SER:O	1:A:1418:SER:OG	2.27	0.52
1:A:2266:ARG:HG2	1:A:2270:ARG:HH22	1.74	0.52
1:A:2523:THR:HA	1:A:2526:GLU:HB3	1.91	0.52
2:B:670:LEU:O	2:B:674:TYR:N	2.34	0.52
1:A:2332:TYR:CZ	1:A:2507:LYS:HE2	2.45	0.52
1:A:2397:ARG:HG2	1:A:2401:HIS:NE2	2.25	0.52
1:A:795:ILE:O	1:A:799:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:887:VAL:O	1:A:891:LEU:HG	2.10	0.52
2:B:161:ASN:O	2:B:164:VAL:HB	2.10	0.52
2:B:210:ALA:HA	2:B:213:ARG:HB2	1.92	0.52
1:A:1901:GLN:HE21	1:A:1905:ARG:NH2	1.97	0.52
1:A:2253:TYR:CZ	1:A:2257:LYS:HG2	2.45	0.52
1:A:743:HIS:O	1:A:747:GLY:N	2.43	0.52
1:A:788:PRO:CD	1:A:828:LEU:HD22	2.40	0.52
1:A:755:ARG:HH12	2:B:483:SER:N	135.35	0.52
3:C:291:ASP:O	3:C:293:LEU:HG	2.10	0.52
3:C:36:ARG:NH1	3:C:74:ASN:H	2.08	0.52
1:A:771:TYR:CD1	1:A:1113:LEU:HD21	77.98	0.52
1:A:1562:GLN:HA	1:A:1565:ASP:OD2	2.10	0.52
1:A:1720:PHE:O	1:A:1724:MET:HG2	2.10	0.52
1:A:1874:SER:HB3	1:A:1916:TRP:CH2	2.45	0.52
1:A:1900:LEU:HB2	1:A:1937:GLN:HE22	1.75	0.52
1:A:2055:HIS:HB3	1:A:2082:GLN:NE2	2.25	0.52
1:A:2245:THR:HB	1:A:2341:PRO:O	2.10	0.52
1:A:2387:MET:HB2	1:A:2391:GLY:HA3	1.92	0.52
1:A:2494:ASN:O	1:A:2498:ILE:HG13	2.09	0.52
1:A:908:GLN:OE1	1:A:1568:ARG:HB3	2.09	0.52
2:B:534:MET:HA	2:B:537:PHE:HA	1.92	0.52
1:A:1188:TYR:OH	1:A:1217:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:1546:TYR:O	1:A:1550:LEU:N	2.37	0.52
1:A:1637:LEU:HA	1:A:1640:ARG: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:2108:PHE:O	1:A:2111:ILE:N	2.43	0.52
1:A:2154:GLN:OE1	1:A:2177:SER:HA	2.10	0.52
1:A:2253:TYR:HB2	1:A:2302:LEU:HD23	1.92	0.52
1:A:777:LYS:HZ2	1:A:821:PHE:HB2	1.75	0.52
2:B:1172:LEU:HA	2:B:1183:ALA:HA	1.93	0.52
2:B:148:PHE:O	2:B:192:PHE:HD2	1.93	0.52
3:C:15:LEU:HD23	3:C:308:TYR:HE2	1.75	0.52
1:A:1551:ALA:CB	1:A:1560:ALA:HB2	2.34	0.51
1:A:1910:TRP:NE1	1:A:1953:VAL:HG13	2.25	0.51
1:A:2335:GLY:HA3	1:A:2362:PHE:HA	1.91	0.51
1:A:712:ILE:HG23	1:A:715:VAL:N	2.25	0.51
2:B:1050:ASP:HB2	2:B:1105:ASN:HD21	1.75	0.51
3:C:257:GLU:OE2	3:C:259:SER:HB2	2.10	0.51
1:A:1028:ARG:HD3	1:A:1032:ASP:OD2	2.11	0.51
1:A:1188:TYR:HE1	1:A:1213:ILE:HA	1.75	0.51
1:A:1932:ILE:HD11	1:A:1964:ILE:HA	1.92	0.51
1:A:2048:PHE:O	1:A:2052:GLU:N	2.41	0.51
1:A:588:THR:N	1:A:589:LEU:HA	2.25	0.51
1:A:685:ALA:HA	1:A:688:ALA:HB3	1.92	0.51
1:A:732:LYS:HZ2	1:A:738:LEU:HD13	1.76	0.51
1:A:757:LEU:HD23	1:A:760:LEU:HD12	1.92	0.51
2:B:498:ILE:O	2:B:500:ALA:N	2.43	0.51
2:B:801:GLY:HA3	2:B:892:VAL:HG11	1.92	0.51
1:A:1090:ARG:O	1:A:1090:ARG:HG3	2.11	0.51
1:A:1784:ARG:O	1:A:1790:TRP:NE1	2.41	0.51
1:A:1991:ALA:O	1:A:1994:ILE:N	2.44	0.51
1:A:2183:VAL:HG12	1:A:2239:TRP:HB3	1.92	0.51
1:A:364:ASP:CB	1:A:401:ALA:HB1	2.41	0.51
1:A:615:HIS:HA	1:A:618:ILE:HD12	1.92	0.51
1:A:624:ARG:HD3	1:A:636:LEU:HD23	1.93	0.51
1:A:647:THR:O	1:A:650:GLN:HB2	2.11	0.51
1:A:970:MET:CB	1:A:972:VAL:H	2.20	0.51
2:B:143:GLU:HB3	2:B:145:ARG:O	2.10	0.51
2:B:492:VAL:C	2:B:494:ILE:H	2.13	0.51
2:B:648:LEU:O	2:B:652:VAL:N	2.44	0.51
3:C:224:LEU:HD11	3:C:272:TRP:CE3	2.44	0.51
3:C:260:ILE:HG23	3:C:273:MET:HE1	1.92	0.51
1:A:878:GLN:NE2	1:A:1621:GLU:O	2.42	0.51
1:A:1936:LEU:HD11	1:A:1968:HIS:CE1	2.45	0.51
1:A:2124:GLN:HA	1:A:2128:PRO:HG3	1.93	0.51
1:A:2213:PRO:O	1:A:2216:LEU:HB3	2.11	0.51

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2376:PRO:HD3	1:A:2531:GLN:CG	2.41	0.51
1:A:640:HIS:CD2	1:A:672:ARG:HG2	2.46	0.51
1:A:918:SER:OG	1:A:921:LYS:HB2	2.10	0.51
1:A:989:PHE:HB2	1:A:990:LEU:HG	1.92	0.51
2:B:1069:ARG:HB2	2:B:1087:ALA:HB3	1.93	0.51
2:B:1183:ALA:N	2:B:1191:ARG:O	2.36	0.51
2:B:161:ASN:HB2	2:B:209:PHE:CE1	2.46	0.51
1:A:1193:PRO:O	1:A:1197:LYS:NZ	2.38	0.51
1:A:1393:TYR:HB3	1:A:1423:LEU:HD13	1.92	0.51
1:A:1901:GLN:OE1	1:A:2413:SER:OG	2.16	0.51
1:A:576:ALA:O	1:A:580:GLY:N	2.40	0.51
1:A:865:LEU:HD21	1:A:903:ILE:HG12	1.93	0.51
2:B:1172:LEU:HA	2:B:1182:VAL:O	2.11	0.51
2:B:267:LEU:HA	2:B:347:PHE:CG	2.46	0.51
2:B:688:GLU:O	2:B:692:TYR:N	2.44	0.51
3:C:179:ASP:HB2	3:C:232:SER:OG	2.11	0.51
3:C:36:ARG:HB2	3:C:74:ASN:OD1	2.11	0.51
3:C:59:ALA:N	3:C:66:ARG:O	2.33	0.51
1:A:1003:VAL:HG12	1:A:1015:GLN:NE2	2.26	0.51
1:A:1048:ILE:H	1:A:1084:HIS:HE1	1.58	0.51
1:A:1092:VAL:HG13	1:A:1095:LYS:HB2	1.93	0.51
1:A:1188:TYR:CE1	1:A:1213:ILE:HA	2.46	0.51
1:A:1395:LYS:O	1:A:1398:HIS:HB3	2.11	0.51
1:A:1491:GLY:O	1:A:1495:GLN:HG3	2.10	0.51
1:A:1720:PHE:O	1:A:1724:MET:N	2.37	0.51
1:A:2008:GLN:HA	1:A:2011:MET:HE2	1.91	0.51
1:A:2010:MET:O	1:A:2014:GLU:HG3	2.11	0.51
1:A:2407:LEU:O	1:A:2410:HIS:N	2.44	0.51
1:A:2511:ARG:CG	1:A:2515:HIS:HA	2.41	0.51
1:A:655:VAL:O	1:A:659:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:679:LEU:HB3	1:A:680:ASP:HA	1.92	0.51
2:B:1094:ARG:HG2	2:B:1118:MET:HB2	1.93	0.51
3:C:81:TYR:CE1	3:C:114:LEU:HD22	2.46	0.51
1:A:1341:ILE:HA	1:A:1344:ALA:HB3	1.93	0.51
1:A:1428:ALA:HB2	1:A:2395:ASN:ND2	2.26	0.51
1:A:1573:ALA:O	1:A:1576:THR:OG1	2.29	0.51
1:A:2173:THR:HA	1:A:2183:VAL:HA	1.93	0.51
1:A:829:GLN:O	1:A:833:LEU:HG	2.10	0.51
2:B:1101:ASP:HA	2:B:1104:LYS:HG2	1.93	0.51
2:B:148:PHE:C	2:B:192:PHE:HD2	2.14	0.51
3:C:267:GLU:O	3:C:269:SER:N	2.44	0.51

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1087:SER:OG	1:A:1088:PRO:HA	2.11	0.51
1:A:1595:MET:SD	1:A:1635:LYS:HB3	2.51	0.51
1:A:1661:GLY:HA2	1:A:1666:LEU:HD23	1.92	0.51
1:A:1749:ARG:O	1:A:1753:LYS:HG2	2.11	0.51
1:A:1805:LYS:O	1:A:1808:ASN:HB3	2.11	0.51
1:A:636:LEU:HD11	1:A:656:LEU:HD13	1.93	0.51
1:A:717:ARG:HH22	1:A:748:ARG:HD2	1.76	0.51
1:A:872:LEU:HD22	1:A:876:GLN:O	2.11	0.51
1:A:920:SER:OG	1:A:1627:GLN:NE2	2.43	0.51
2:B:96:GLN:HB3	2:B:99:LEU:CB	2.41	0.51
3:C:95:GLU:H	3:C:140:GLN:NE2	2.09	0.51
1:A:1382:LEU:HD23	1:A:1385:GLU:OE1	2.11	0.51
1:A:1684:GLN:H	1:A:1687:HIS:CD2	2.29	0.51
1:A:1988:HIS:CD2	1:A:1992:ASN:ND2	2.79	0.51
1:A:2013:SER:HA	1:A:2016:LEU:HB2	1.93	0.51
1:A:2170:ARG:HB2	1:A:2186:LEU:HB3	1.92	0.51
1:A:313:ILE:CB	1:A:321:ALA:HB1	2.41	0.51
2:B:385:ALA:O	2:B:389:CYS:N	2.35	0.51
2:B:495:TRP:C	2:B:497:LYS:N	2.63	0.51
3:C:289:SER:O	3:C:315:VAL:N	2.44	0.51
1:A:1159:ILE:CG2	1:A:1198:VAL:HG11	2.41	0.51
1:A:698:VAL:HG11	1:A:1191:PHE:HE1	117.29	0.51
1:A:1920:ASN:O	1:A:1924:VAL:HG23	2.11	0.51
1:A:2077:ASP:HA	1:A:2080:GLU:HB3	1.93	0.51
1:A:2107:VAL:O	1:A:2110:ARG:HB2	2.11	0.51
1:A:2295:ALA:O	1:A:2381:ARG:NH1	2.35	0.51
1:A:2376:PRO:HD3	1:A:2531:GLN:HG2	1.93	0.51
1:A:713:CYS:O	1:A:714:THR:OG1	2.27	0.51
1:A:997:PHE:O	1:A:1000:VAL:N	2.44	0.51
2:B:492:VAL:O	2:B:494:ILE:N	2.42	0.51
2:B:789:ARG:HB2	2:B:890:ASN:HA	1.93	0.51
2:B:895:GLN:HB3	2:B:898:SER:O	2.11	0.51
3:C:91:VAL:HA	3:C:102:THR:HG22	1.93	0.51
1:A:1109:ASP:C	1:A:1111:LEU:H	2.14	0.50
1:A:1135:ALA:O	1:A:1139:VAL:HG23	2.11	0.50
1:A:349:PRO:N	1:A:350:SER:HA	2.27	0.50
1:A:594:PHE:HA	1:A:597:HIS:CD2	2.46	0.50
1:A:717:ARG:HH12	1:A:748:ARG:CD	2.23	0.50
1:A:710:LEU:HD23	1:A:741:LEU:HD11	1.93	0.50
3:C:238:CYS:HA	3:C:273:MET:CG	2.42	0.50
3:C:66:ARG:HB3	3:C:68:TYR:CE2	2.46	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1067:PHE:HD1	1:A:1069:LEU:HB2	1.76	0.50
1:A:1421:ASN:C	1:A:1424:GLN:H	2.15	0.50
1:A:1619:TRP:HH2	1:A:1643:VAL:HG11	1.77	0.50
1:A:2027:TRP:HH2	1:A:2055:HIS:CG	2.30	0.50
1:A:2081:ALA:HA	1:A:2084:TRP:CD1	2.46	0.50
1:A:679:LEU:HB3	1:A:680:ASP:OD1	2.12	0.50
1:A:763:ASN:C	1:A:767:LEU:HG	2.31	0.50
1:A:750:LYS:NZ	1:A:790:PRO:HA	2.27	0.50
1:A:837:ARG:O	1:A:839:VAL:N	2.45	0.50
1:A:878:GLN:CD	1:A:1625:GLY:HA3	2.31	0.50
1:A:973:GLN:N	1:A:1011:PHE:HE1	2.09	0.50
2:B:89:ASP:HB2	2:B:153:HIS:HA	1.93	0.50
2:B:587:ASN:O	2:B:591:ALA:N	2.25	0.50
1:A:993:VAL:HB	1:A:1030:TYR:HH	1.77	0.50
1:A:2372:PRO:HB2	1:A:2374:LYS:CE	2.41	0.50
1:A:2526:GLU:O	1:A:2529:ILE:HB	2.12	0.50
1:A:631:THR:O	1:A:634:ILE:N	2.40	0.50
1:A:702:ASP:HA	1:A:705:PHE:CD2	2.42	0.50
1:A:833:LEU:HD23	1:A:836:LYS:HD2	1.94	0.50
2:B:613:PRO:HA	2:B:617:CYS:H	1.75	0.50
3:C:229:SER:O	3:C:232:SER:N	2.36	0.50
3:C:81:TYR:CZ	3:C:114:LEU:HD22	2.47	0.50
1:A:1046:THR:O	1:A:1048:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:1715:GLN:HG3	1:A:1719:HIS:CD2	2.47	0.50
1:A:1808:ASN:CG	1:A:1873:LEU:HD21	2.32	0.50
1:A:2421:PHE:O	1:A:2430:ARG:NH2	2.42	0.50
1:A:850:SER:O	1:A:854:VAL:HG23	2.12	0.50
1:A:888:LEU:O	1:A:892:GLY:N	2.34	0.50
1:A:970:MET:CE	1:A:973:GLN:HB2	2.42	0.50
1:A:981:SER:HB2	1:A:985:LYS:CE	2.41	0.50
3:C:221:ARG:HD3	3:C:241:ASP:HB3	1.94	0.50
3:C:271:GLY:HA2	3:C:290:SER:HB2	1.93	0.50
1:A:1114:LEU:O	1:A:1117:PRO:HD2	2.12	0.50
1:A:1115:LEU:HD23	1:A:1118:ILE:HD12	1.92	0.50
1:A:1295:SER:HA	1:A:1296:SER:C	2.32	0.50
1:A:1496:GLN:HA	1:A:1499:GLU:HB2	1.92	0.50
1:A:1571:LEU:HA	1:A:1574:GLU:HB3	1.94	0.50
1:A:2022:LEU:O	1:A:2026:MET:HG3	2.12	0.50
1:A:2022:LEU:HB3	1:A:2024:HIS:CE1	2.47	0.50
1:A:2054:LEU:O	1:A:2057:MET:HB3	2.11	0.50
1:A:982:LEU:HD22	1:A:986:CYS:SG	2.51	0.50

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:213:LYS:HD3	3:C:252:PHE:CE2	2.47	0.50
1:A:1046:THR:OG1	1:A:1048:ILE:HG23	2.12	0.50
1:A:1566:LYS:O	1:A:1569:ASP:N	2.45	0.50
1:A:1733:ALA:O	1:A:1736:ASP:N	2.42	0.50
1:A:1878:LEU:HD12	1:A:1916:TRP:HE3	1.77	0.50
1:A:2191:ASP:HA	1:A:2232:THR:O	2.12	0.50
1:A:771:TYR:CB	1:A:783:LEU:HD21	2.42	0.50
3:C:207:VAL:HG12	3:C:209:GLN:HG2	1.94	0.50
3:C:22:HIS:HB3	3:C:41:GLN:HG2	1.93	0.50
3:C:236:ALA:HB1	3:C:244:CYS:SG	2.52	0.50
3:C:28:GLN:HB2	3:C:30:HIS:CE1	2.46	0.50
1:A:1036:THR:HG22	1:A:1073:GLN:HE21	1.77	0.50
1:A:776:LEU:HD13	1:A:817:VAL:HG23	1.94	0.50
3:C:276:CYS:HA	3:C:286:VAL:O	2.11	0.50
1:A:1138:THR:O	1:A:1141:ARG:N	2.45	0.50
1:A:1615:ILE:HA	1:A:1618:ILE:HD12	1.93	0.50
1:A:1618:ILE:HA	1:A:1621:GLU:OE1	2.12	0.50
1:A:2032:GLU:O	1:A:2036:ARG:HG2	2.12	0.50
1:A:2036:ARG:O	1:A:2040:GLY:N	2.43	0.50
1:A:2077:ASP:O	1:A:2081:ALA:N	2.38	0.50
1:A:2313:TRP:HH2	1:A:2317:ARG:NH1	2.10	0.50
1:A:2388:GLU:O	1:A:2391:GLY:N	2.45	0.50
1:A:654:ASP:O	1:A:657:SER:OG	2.26	0.50
1:A:679:LEU:HD11	1:A:715:VAL:HG11	1.93	0.50
1:A:862:PRO:O	1:A:865:LEU:HB2	2.12	0.50
1:A:947:TYR:HB2	1:A:950:VAL:CG2	2.42	0.50
2:B:1049:TRP:HE3	2:B:1055:GLU:HA	1.76	0.50
3:C:199:LEU:HA	3:C:209:GLN:O	2.12	0.50
1:A:1202:HIS:CD2	1:A:1204:ILE:HD11	2.41	0.50
1:A:1380:ILE:O	1:A:1383:LEU:N	2.45	0.50
1:A:1435:TYR:CZ	1:A:1439:HIS:CD2	3.00	0.50
1:A:1742:GLU:N	1:A:1742:GLU:OE1	2.43	0.50
1:A:2289:HIS:HA	1:A:2292:ASN:ND2	2.27	0.50
1:A:320:GLN:O	1:A:323:GLN:N	2.45	0.50
1:A:719:SER:OG	1:A:722:ASN:ND2	2.45	0.50
2:B:263:PHE:HZ	2:B:436:VAL:HA	1.76	0.50
3:C:130:PRO:HG2	3:C:148:GLN:HB3	1.93	0.50
3:C:54:ARG:HD3	3:C:323:SER:HB2	1.94	0.50
3:C:68:TYR:HB3	3:C:75:PRO:HG2	1.94	0.50
1:A:1135:ALA:O	1:A:1176:THR:HG22	2.12	0.49
1:A:1485:GLU:OE1	1:A:1515:MET:HG2	2.12	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1623:LEU:HD21	1:A:1633:TRP:CZ2	2.47	0.49
1:A:1626:CYS:HB3	1:A:1628:ARG:HG2	1.93	0.49
1:A:1718:GLN:O	1:A:1722:GLN:HG3	2.12	0.49
1:A:2197:ARG:O	1:A:2200:GLN:HB3	2.12	0.49
1:A:669:PRO:HA	1:A:672:ARG:HD2	1.93	0.49
1:A:702:ASP:O	1:A:705:PHE:HB2	2.12	0.49
1:A:981:SER:HB2	1:A:985:LYS:HE3	1.94	0.49
2:B:108:LYS:O	2:B:112:ASN:N	2.42	0.49
2:B:83:ARG:HA	2:B:116:ARG:HB2	1.94	0.49
3:C:13:VAL:HA	3:C:322:ASP:OD1	2.12	0.49
3:C:129:ALA:HB3	3:C:147:ASP:CG	2.33	0.49
3:C:167:PRO:HB2	3:C:195:TYR:CG	2.47	0.49
3:C:39:GLN:HB3	3:C:41:GLN:NE2	2.27	0.49
1:A:1110:TYR:CE1	1:A:1113:LEU:HD12	2.47	0.49
1:A:1177:LEU:O	1:A:1181:VAL:HG23	2.12	0.49
1:A:1188:TYR:CE2	1:A:1220:TYR:HE2	2.30	0.49
1:A:922:SER:N	1:A:1583:TYR:OH	2.46	0.49
1:A:1589:ALA:O	1:A:1592:SER:HB2	2.12	0.49
1:A:1487:LEU:C	1:A:1665:ARG:HH12	2.15	0.49
1:A:1773:LEU:HA	1:A:1793:TRP:CD1	2.47	0.49
1:A:1964:ILE:HG22	1:A:1972:LEU:HD11	1.93	0.49
1:A:2180:HIS:HB2	1:A:2182:PHE:CZ	2.47	0.49
1:A:2423:TYR:O	1:A:2428:ASN:ND2	2.45	0.49
1:A:667:PRO:O	1:A:670:ASP:HB2	2.13	0.49
1:A:697:PHE:CA	1:A:708:ARG:HD2	2.42	0.49
1:A:712:ILE:HA	1:A:713:CYS:C	2.32	0.49
1:A:722:ASN:O	1:A:726:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:732:LYS:NZ	1:A:738:LEU:HD13	2.27	0.49
1:A:920:SER:HB2	1:A:924:GLN:NE2	2.28	0.49
2:B:413:LEU:HA	2:B:416:PHE:HB2	1.93	0.49
3:C:100:MET:HE2	3:C:112:TRP:CG	2.48	0.49
1:A:1129:LEU:HB3	1:A:1133:LYS:NZ	2.26	0.49
1:A:1206:HIS:HB3	1:A:1207:GLN:HG2	1.94	0.49
1:A:1888:PHE:O	1:A:1891:SER:OG	2.29	0.49
1:A:2012:VAL:O	1:A:2016:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:2230:LEU:HB2	1:A:2234:SER:OG	2.13	0.49
1:A:2404:MET:HB3	1:A:2521:VAL:HG13	1.95	0.49
1:A:2534:SER:O	1:A:2538:LEU:HG	2.13	0.49
1:A:600:THR:O	1:A:604:ARG:HG3	2.12	0.49
1:A:631:THR:O	1:A:633:SER:N	2.45	0.49
1:A:767:LEU:O	1:A:770:PRO:HG2	2.12	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:871:PHE:O	1:A:875:GLU:N	2.45	0.49
1:A:912:ALA:HB1	1:A:1597:SER:HB3	1.95	0.49
1:A:972:VAL:HG13	1:A:975:ILE:HD12	1.95	0.49
2:B:584:ILE:O	2:B:587:ASN:N	2.45	0.49
3:C:87:ASN:HB2	3:C:105:GLU:OE2	2.12	0.49
1:A:1187:LYS:HG3	1:A:1191:PHE:CE2	2.48	0.49
1:A:1543:GLY:O	1:A:1547:ARG:NH1	2.43	0.49
1:A:1598:GLU:CD	1:A:1640:ARG:HH21	2.15	0.49
1:A:1768:THR:O	1:A:1772:VAL:HG22	2.13	0.49
1:A:1789:ALA:O	1:A:1793:TRP:N	2.45	0.49
1:A:2115:LEU:HB2	1:A:2116:PRO:HD3	1.95	0.49
1:A:2266:ARG:HB2	1:A:2266:ARG:CZ	2.43	0.49
1:A:2423:TYR:C	1:A:2428:ASN:HD21	2.16	0.49
1:A:594:PHE:HA	1:A:597:HIS:HD2	1.78	0.49
1:A:722:ASN:O	1:A:725:PHE:N	2.46	0.49
1:A:777:LYS:HE3	1:A:819:GLU:HA	1.94	0.49
1:A:939:GLY:O	1:A:943:LEU:HG	2.12	0.49
2:B:1085:LEU:N	2:B:1096:TRP:HD1	2.10	0.49
3:C:174:THR:OG1	3:C:188:VAL:HG13	2.12	0.49
1:A:1028:ARG:HG3	1:A:1029:PRO:CA	2.41	0.49
1:A:1040:GLU:O	1:A:1044:MET:HG2	2.12	0.49
1:A:1174:MET:HE1	1:A:1208:ARG:H	1.77	0.49
1:A:2029:GLU:HG3	1:A:2030:GLY:N	2.28	0.49
1:A:2056:ALA:O	1:A:2059:GLU:HB3	2.12	0.49
1:A:2146:PRO:HG2	1:A:2147:ASN:ND2	2.28	0.49
1:A:2189:HIS:N	1:A:2233:ASN:O	2.46	0.49
1:A:2214:THR:HG22	1:A:2218:LYS:HG3	1.94	0.49
1:A:2379:LEU:HD21	1:A:2392:LEU:HD21	1.94	0.49
1:A:851:THR:O	1:A:855:VAL:N	2.40	0.49
2:B:422:MET:CG	2:B:434:PRO:HD2	2.43	0.49
1:A:755:ARG:NH2	2:B:482:SER:H	131.87	0.49
3:C:86:LYS:HB2	3:C:105:GLU:HB2	1.95	0.49
3:C:137:HIS:O	3:C:140:GLN:N	2.29	0.49
3:C:153:HIS:HD2	3:C:162:ASN:ND2	2.09	0.49
1:A:1404:PHE:CE2	1:A:2389:VAL:HB	2.48	0.49
1:A:1882:VAL:N	1:A:1883:PRO:HD2	2.28	0.49
1:A:2079:MET:O	1:A:2082:GLN:HB3	2.12	0.49
1:A:948:PRO:HA	1:A:951:SER:OG	2.13	0.49
3:C:51:THR:OG1	3:C:53:ASP:OD1	2.22	0.49
1:A:1389:LYS:N	1:A:1392:ALA:HB3	2.28	0.49
1:A:2101:TRP:HB3	1:A:2105:TYR:HE2	1.78	0.49

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2278:LEU:O	1:A:2283:LYS:HE2	2.13	0.49
1:A:2247:HIS:HB2	1:A:2341:PRO:C	2.33	0.49
1:A:2505:ARG:O	1:A:2509:THR:OG1	2.22	0.49
1:A:624:ARG:HG2	1:A:635:HIS:HB3	1.94	0.49
1:A:918:SER:HA	1:A:1627:GLN:HB2	1.94	0.49
1:A:974:ALA:HA	1:A:977:PHE:CD2	2.48	0.49
1:A:988:GLN:HG2	1:A:989:PHE:CD2	2.47	0.49
3:C:203:ILE:HG12	3:C:208:THR:HB	1.95	0.49
1:A:2285:GLU:OE1	3:C:274:TRP:HZ2	1.95	0.49
3:C:284:TYR:HB3	3:C:296:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:1101:GLN:O	1:A:1104:GLY:N	2.45	0.49
1:A:1481:MET:HE1	1:A:1497:CYS:H	1.82	0.49
1:A:1629:ILE:H	1:A:1629:ILE:HD12	1.78	0.49
1:A:1712:ASP:HA	1:A:1715:GLN:CB	2.42	0.49
1:A:2308:PRO:HD2	1:A:2312:VAL:HG11	1.95	0.49
1:A:2535:HIS:HD2	1:A:2538:LEU:HD12	1.78	0.49
1:A:744:SER:O	1:A:747:GLY:N	2.45	0.49
1:A:886:ARG:O	1:A:890:LEU:HG	2.13	0.49
3:C:200:THR:OG1	3:C:209:GLN:HB2	2.13	0.49
3:C:279:SER:C	3:C:282:SER:H	2.13	0.49
1:A:1057:GLU:HB3	1:A:1101:GLN:OE1	2.12	0.49
1:A:1808:ASN:HB2	1:A:1873:LEU:HD21	1.95	0.49
1:A:1917:PRO:O	1:A:1921:GLU:HG3	2.13	0.49
1:A:2012:VAL:HG12	1:A:2016:LEU:HG	1.95	0.49
1:A:704:VAL:HG12	1:A:708:ARG:CZ	2.43	0.49
1:A:962:GLN:O	1:A:965:SER:OG	2.20	0.49
1:A:977:PHE:HA	1:A:1018:MET:HE1	1.95	0.49
2:B:132:LYS:O	2:B:136:SER:N	2.34	0.49
3:C:107:CYS:SG	3:C:130:PRO:HA	2.53	0.49
3:C:248:ARG:HB2	3:C:251:ASN:HB2	1.95	0.49
1:A:1582:SER:OG	1:A:1583:TYR:N	2.45	0.49
1:A:1658:SER:O	1:A:1662:LYS:N	2.35	0.49
1:A:1940:PRO:HG2	1:A:1941:GLN:OE1	2.13	0.49
1:A:1945:ARG:NH2	1:A:2425:PRO:HD3	2.28	0.49
1:A:2005:LEU:HA	1:A:2008:GLN:HB2	1.95	0.49
1:A:2513:PHE:HB2	1:A:2519:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:777:LYS:C	1:A:779:LEU:N	2.65	0.49
3:C:227:ARG:O	3:C:235:LEU:HA	2.13	0.49
3:C:20:TYR:CD2	3:C:313:LYS:HD2	2.47	0.49
3:C:49:GLU:HG3	3:C:91:VAL:HG23	1.95	0.49
1:A:1586:ALA:HA	1:A:1589:ALA:HB3	1.95	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1595:MET:HA	1:A:1598:GLU:HB2	1.95	0.48
1:A:1651:ARG:HG3	1:A:1652:THR:N	2.28	0.48
1:A:2369:GLU:O	1:A:2372:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:909:SER:HA	1:A:912:ALA:HB3	1.95	0.48
2:B:147:LEU:HA	2:B:190:SER:OG	2.13	0.48
2:B:211:LEU:HA	2:B:214:GLU:OE1	2.13	0.48
1:A:1041:PHE:HA	1:A:1044:MET:CG	2.44	0.48
1:A:1043:VAL:N	1:A:1077:HIS:CE1	2.73	0.48
1:A:919:GLU:HA	1:A:1583:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:1899:ASN:OD1	1:A:1899:ASN:N	2.44	0.48
1:A:2228:ILE:O	1:A:2236:LEU:N	2.40	0.48
1:A:2272:ALA:HB1	1:A:2278:LEU:HD11	1.94	0.48
1:A:576:ALA:HA	1:A:579:VAL:CB	2.44	0.48
2:B:1194:ASP:HB3	2:B:1215:VAL:HG13	1.95	0.48
3:C:86:LYS:HB3	3:C:105:GLU:OE1	2.13	0.48
1:A:1067:PHE:HB3	1:A:1069:LEU:N	2.27	0.48
1:A:1400:LYS:CD	1:A:1416:LEU:HA	2.40	0.48
1:A:1474:PRO:HB3	1:A:1508:THR:OG1	2.13	0.48
1:A:1515:MET:O	1:A:1519:ALA:N	2.42	0.48
1:A:1545:PHE:HD2	1:A:1546:TYR:CD2	2.32	0.48
1:A:2076:ARG:NH1	1:A:2077:ASP:OD1	2.47	0.48
1:A:2129:LYS:O	1:A:2132:MET:HB3	2.14	0.48
1:A:659:LEU:HB2	1:A:660:LEU:O	2.13	0.48
2:B:728:ALA:HA	2:B:729:VAL:HA	1.70	0.48
1:A:1037:LEU:HB3	1:A:1041:PHE:HE2	1.79	0.48
1:A:1152:ALA:O	1:A:1187:LYS:NZ	2.33	0.48
1:A:1490:TRP:CE3	1:A:1519:ALA:HA	2.48	0.48
1:A:2105:TYR:O	1:A:2109:ARG:HG2	2.14	0.48
2:B:778:ILE:N	2:B:1251:GLN:O	2.47	0.48
3:C:137:HIS:CG	3:C:138:PRO:HD2	2.49	0.48
1:A:1009:ARG:HB3	1:A:1013:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:1031:MET:C	1:A:1033:GLU:H	2.17	0.48
1:A:1115:LEU:N	1:A:1116:PRO:HD2	2.28	0.48
1:A:1140:ASP:O	1:A:1144:GLU:HG3	2.14	0.48
1:A:1393:TYR:CB	1:A:1423:LEU:HD13	2.44	0.48
1:A:1667:ALA:HA	1:A:1670:HIS:HB3	1.96	0.48
1:A:2025:GLU:HA	1:A:2028:HIS:HB3	1.96	0.48
1:A:2030:GLY:O	1:A:2034:ALA:N	2.30	0.48
1:A:2031:LEU:HD13	1:A:2108:PHE:HB2	1.95	0.48
1:A:2193:ARG:HH22	1:A:2429:TRP:HZ2	1.62	0.48
1:A:2194:GLN:O	1:A:2198:VAL:HG23	2.13	0.48

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2267:ILE:HA	1:A:2270:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:2510:GLY:HA2	1:A:2524:GLN:NE2	2.28	0.48
1:A:661:VAL:HG11	1:A:669:PRO:HG3	1.96	0.48
1:A:869:LEU:HB2	1:A:870:ASN:OD1	2.14	0.48
2:B:133:LEU:HA	2:B:136:SER:CB	2.44	0.48
2:B:386:VAL:O	2:B:390:LEU:N	2.35	0.48
1:A:1480:ARG:NH1	1:A:1484:LEU:HD11	2.29	0.48
1:A:1927:VAL:O	1:A:1930:ILE:HG22	2.14	0.48
1:A:2284:VAL:O	1:A:2288:GLU:N	2.29	0.48
1:A:2329:MET:O	1:A:2332:TYR:HB3	2.13	0.48
1:A:659:LEU:H	1:A:660:LEU:HA	1.79	0.48
1:A:684:ASP:O	1:A:688:ALA:N	2.38	0.48
1:A:779:LEU:O	1:A:782:LYS:N	2.47	0.48
2:B:217:LEU:HD13	2:B:257:ASP:H	1.78	0.48
3:C:284:TYR:C	3:C:299:VAL:HG23	2.34	0.48
3:C:291:ASP:CB	3:C:295:ARG:HH22	2.27	0.48
3:C:79:ILE:HG23	3:C:119:LEU:HD22	1.96	0.48
1:A:1012:LEU:HD23	1:A:1015:GLN:OE1	2.13	0.48
1:A:698:VAL:HG11	1:A:1191:PHE:CE1	117.46	0.48
1:A:1595:MET:SD	1:A:1635:LYS:HE3	2.53	0.48
1:A:2032:GLU:O	1:A:2035:SER:OG	2.28	0.48
1:A:2047:MET:O	1:A:2050:VAL:HB	2.14	0.48
1:A:2339:ARG:HD2	1:A:2344:LEU:HD23	1.96	0.48
1:A:296:HIS:HA	1:A:297:ASP:HA	1.62	0.48
1:A:666:ASP:O	1:A:669:PRO:HG2	2.14	0.48
2:B:441:LEU:HA	2:B:442:SER:HA	1.55	0.48
3:C:278:PHE:HD1	3:C:282:SER:HB3	1.78	0.48
1:A:1091:ILE:O	1:A:1092:VAL:HB	2.14	0.48
1:A:1102:LEU:O	1:A:1105:ALA:N	2.45	0.48
1:A:1907:LEU:HD21	1:A:1935:TRP:HZ3	1.79	0.48
1:A:2008:GLN:OE1	1:A:2137:GLU:HG2	2.14	0.48
1:A:2165:SER:HB2	1:A:2169:PRO:CD	2.44	0.48
1:A:2152:ARG:HB2	1:A:2177:SER:CB	2.41	0.48
1:A:2297:ASP:O	1:A:2301:LYS:HG3	2.14	0.48
1:A:604:ARG:HB3	1:A:616:LYS:HE2	1.95	0.48
1:A:870:ASN:O	1:A:874:THR:N	2.47	0.48
2:B:1095:VAL:HB	2:B:1116:SER:HB3	1.96	0.48
3:C:175:SER:OG	3:C:225:GLN:HG3	2.14	0.48
1:A:1495:GLN:HB3	1:A:1499:GLU:OE2	2.14	0.48
1:A:1493:LEU:HG	1:A:1519:ALA:HB2	1.95	0.48
1:A:1728:ALA:HB1	1:A:1740:LYS:HG3	1.96	0.48

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1969:PRO:O	1:A:1973:ILE:N	2.38	0.48
1:A:2372:PRO:HB2	1:A:2374:LYS:NZ	2.29	0.48
1:A:311:ARG:O	1:A:315:PRO:N	2.47	0.48
1:A:330:LEU:HA	1:A:365:LEU:O	2.14	0.48
1:A:780:ILE:O	1:A:783:LEU:HB2	2.14	0.48
1:A:786:PRO:O	1:A:790:PRO:HD2	2.14	0.48
2:B:133:LEU:HD21	2:B:167:PHE:CE1	2.49	0.48
2:B:82:ALA:HB1	2:B:145:ARG:O	2.14	0.48
2:B:920:SER:CB	2:B:929:MET:HB2	2.44	0.48
3:C:150:GLY:HA3	3:C:171:VAL:O	2.14	0.48
3:C:278:PHE:HB3	3:C:282:SER:OG	2.14	0.48
3:C:295:ARG:HB3	3:C:304:ILE:HD11	1.96	0.48
1:A:1093:SER:O	1:A:1097:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:1184:LEU:HA	1:A:1184:LEU:HD23	1.71	0.48
1:A:1384:GLY:O	1:A:1387:ALA:N	2.39	0.48
1:A:1421:ASN:OD1	1:A:1426:PRO:HA	2.14	0.48
1:A:2347:ASP:N	1:A:2352:LYS:O	2.36	0.48
1:A:535:ILE:HA	1:A:536:GLN:HA	1.69	0.48
1:A:648:ALA:O	1:A:652:VAL:N	2.37	0.48
1:A:807:GLN:O	1:A:810:GLY:N	2.47	0.48
3:C:288:ALA:HB1	3:C:315:VAL:O	2.14	0.48
1:A:1012:LEU:O	1:A:1016:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:1117:PRO:O	1:A:1121:LEU:N	2.47	0.47
1:A:1119:VAL:HG21	1:A:1154:ARG:HB3	1.96	0.47
1:A:1506:ASP:O	1:A:1509:GLN:HB3	2.14	0.47
1:A:1700:TYR:O	1:A:1703:ASN:HB3	2.14	0.47
1:A:1913:TYR:CB	1:A:1919:VAL:HG21	2.44	0.47
1:A:1920:ASN:CB	1:A:1952:LEU:HD23	2.44	0.47
1:A:2115:LEU:O	1:A:2118:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:2140:VAL:HG11	1:A:2182:PHE:HD2	1.79	0.47
1:A:2282:GLN:O	1:A:2285:GLU:N	2.47	0.47
1:A:2307:SER:OG	1:A:2313:TRP:HB2	2.13	0.47
1:A:543:LEU:O	1:A:547:LEU:N	2.42	0.47
3:C:148:GLN:HA	3:C:172:SER:HB2	1.95	0.47
3:C:200:THR:O	3:C:208:THR:HA	2.14	0.47
3:C:16:ALA:HB3	3:C:319:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:698:VAL:HG21	1:A:1191:PHE:CE1	118.79	0.47
1:A:1430:ALA:O	1:A:1434:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:1444:GLU:O	1:A:1446:GLN:HG3	2.14	0.47
1:A:1657:ALA:HB1	1:A:1669:ALA:HB1	1.96	0.47
1:A:2084:TRP:HB3	1:A:2100:ALA:HB2	1.96	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2245:THR:HA	1:A:2345:MET:HA	1.96	0.47
1:A:2345:MET:HG3	1:A:2354:LEU:HB3	1.96	0.47
1:A:819:GLU:O	1:A:822:ILE:HG13	2.14	0.47
2:B:1072:ALA:O	2:B:1084:LEU:HA	2.14	0.47
3:C:224:LEU:HD12	3:C:273:MET:O	2.14	0.47
1:A:1365:GLU:O	1:A:1368:ASP:N	2.47	0.47
1:A:1378:ASN:O	1:A:1381:VAL:HB	2.14	0.47
1:A:1578:MET:O	1:A:1581:GLU:HB2	2.14	0.47
1:A:2084:TRP:CB	1:A:2100:ALA:HB2	2.44	0.47
1:A:2165:SER:HB2	1:A:2169:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:2424:ASP:HB3	1:A:2427:LEU:HB2	1.96	0.47
1:A:918:SER:O	1:A:920:SER:N	2.48	0.47
1:A:1076:PRO:O	1:A:1079:LEU:HD12	2.14	0.47
1:A:1125:PRO:HG2	1:A:1127:ALA:H	1.79	0.47
1:A:1092:VAL:HG11	1:A:1130:PRO:CB	2.45	0.47
1:A:1152:ALA:HA	1:A:1187:LYS:NZ	2.29	0.47
1:A:1501:TRP:CZ2	1:A:1509:GLN:HG3	2.49	0.47
1:A:1649:ASP:O	1:A:1652:THR:N	2.47	0.47
1:A:1633:TRP:CH2	1:A:1659:LEU:HD12	2.50	0.47
1:A:2026:MET:HA	1:A:2029:GLU:OE2	2.14	0.47
1:A:2035:SER:HA	1:A:2038:TYR:HB3	1.97	0.47
1:A:2123:LEU:HD23	1:A:2131:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:2247:HIS:HA	1:A:2341:PRO:HB2	1.95	0.47
1:A:919:GLU:HA	1:A:1583:TYR:CE1	2.49	0.47
2:B:1095:VAL:HB	2:B:1117:ASP:H	1.80	0.47
2:B:802:VAL:HG12	2:B:810:GLN:O	2.13	0.47
3:C:22:HIS:ND1	3:C:41:GLN:HA	2.29	0.47
3:C:32:GLY:HA2	3:C:308:TYR:HE1	1.80	0.47
3:C:40:HIS:HE1	3:C:61:GLY:HA2	1.80	0.47
1:A:1028:ARG:HA	1:A:1031:MET:HG2	1.97	0.47
1:A:1593:CYS:O	1:A:1596:LEU:N	2.47	0.47
1:A:1612:ARG:O	1:A:1614:ILE:N	2.47	0.47
1:A:1649:ASP:CG	1:A:1652:THR:HB	2.35	0.47
1:A:1808:ASN:ND2	1:A:1812:ASP:OD2	2.45	0.47
1:A:2115:LEU:C	1:A:2117:GLN:H	2.18	0.47
1:A:2494:ASN:ND2	1:A:2498:ILE:HD11	2.29	0.47
1:A:590:GLY:HA3	1:A:591:SER:HA	1.72	0.47
1:A:599:LEU:HA	1:A:602:PHE:HD2	1.79	0.47
1:A:637:ILE:HG13	1:A:672:ARG:NH2	2.29	0.47
3:C:188:VAL:HG11	3:C:226:CYS:H	1.80	0.47
3:C:21:ASP:N	3:C:21:ASP:OD1	2.47	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:50:VAL:HG11	3:C:70:LEU:CD1	2.45	0.47
1:A:1467:MET:SD	1:A:1480:ARG:HD2	2.55	0.47
1:A:1790:TRP:C	1:A:1891:SER:HB3	2.35	0.47
1:A:2187:LYS:O	1:A:2234:SER:HA	2.15	0.47
1:A:2314:PHE:HD1	1:A:2317:ARG:HH21	1.61	0.47
3:C:98:ARG:CD	3:C:115:ARG:HB2	2.45	0.47
3:C:144:ILE:HG21	3:C:185:MET:SD	2.55	0.47
3:C:152:ILE:HD13	3:C:185:MET:HE3	2.03	0.47
3:C:14:ILE:CD1	3:C:70:LEU:HD13	2.43	0.47
1:A:1113:LEU:HA	1:A:1113:LEU:HD23	1.39	0.47
1:A:1973:ILE:HG13	1:A:1974:TYR:N	2.30	0.47
1:A:2044:VAL:HG11	1:A:2088:TYR:CD2	2.48	0.47
1:A:624:ARG:HD3	1:A:636:LEU:CD2	2.45	0.47
1:A:717:ARG:HH22	1:A:748:ARG:HH11	1.62	0.47
1:A:851:THR:O	1:A:854:VAL:N	2.47	0.47
1:A:861:TYR:O	1:A:865:LEU:HG	2.15	0.47
2:B:1148:ARG:HA	2:B:1161:ILE:HA	1.95	0.47
2:B:207:LYS:O	2:B:211:LEU:HG	2.14	0.47
2:B:780:SER:H	2:B:1250:LEU:HA	1.80	0.47
3:C:112:TRP:CE2	3:C:121:CYS:HB3	2.50	0.47
3:C:188:VAL:CG1	3:C:226:CYS:H	2.28	0.47
3:C:8:VAL:HG12	3:C:70:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:1026:HIS:CB	1:A:1031:MET:HE2	2.43	0.47
1:A:1052:ILE:HG22	1:A:1056:ILE:HG13	1.97	0.47
1:A:1099:ALA:HB1	1:A:1137:GLU:OE1	2.15	0.47
1:A:1108:ASP:OD1	1:A:1146:LEU:HD12	2.15	0.47
1:A:1159:ILE:HG22	1:A:1198:VAL:HG11	1.96	0.47
1:A:1501:TRP:HZ2	1:A:1535:MET:HE2	1.79	0.47
1:A:1764:ILE:HA	1:A:1768:THR:HG21	1.97	0.47
1:A:1910:TRP:CH2	1:A:1956:LEU:HB3	2.50	0.47
1:A:2503:ARG:O	1:A:2506:ASP:HB2	2.15	0.47
1:A:600:THR:HB	1:A:604:ARG:HE	1.80	0.47
1:A:606:CYS:SG	1:A:613:SER:HB3	2.55	0.47
1:A:654:ASP:HB3	1:A:658:LYS:CE	2.40	0.47
1:A:685:ALA:O	1:A:689:GLN:HG3	2.15	0.47
1:A:758:GLY:O	1:A:761:VAL:HB	2.15	0.47
1:A:776:LEU:HA	1:A:777:LYS:HA	1.41	0.47
1:A:868:LEU:O	1:A:872:LEU:HG	2.15	0.47
2:B:165:TRP:HA	2:B:168:ASN:HB3	1.97	0.47
2:B:387:ASP:O	2:B:391:SER:N	2.27	0.47
2:B:638:THR:O	2:B:642:HIS:N	2.48	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:111:ILE:HD12	3:C:123:ARG:HB2	1.97	0.47
1:A:1611:ARG:C	1:A:1613:GLU:H	2.18	0.47
1:A:2339:ARG:HD3	1:A:2339:ARG:HA	1.68	0.47
1:A:2378:ARG:HG2	1:A:2383:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:673:TYR:CD1	1:A:676:LEU:HD12	2.50	0.47
1:A:687:LEU:O	1:A:691:GLU:HG3	2.15	0.47
1:A:724:ALA:O	1:A:728:PRO:HD3	2.15	0.47
1:A:833:LEU:CA	1:A:836:LYS:HB2	2.41	0.47
1:A:901:VAL:HG12	1:A:905:MET:HG2	1.97	0.47
2:B:1137:LEU:HD22	2:B:1151:ASP:HA	1.97	0.47
3:C:20:TYR:HB2	3:C:313:LYS:CG	2.45	0.47
3:C:240:ALA:HA	3:C:272:TRP:CE3	2.49	0.47
1:A:1075:ILE:N	1:A:1078:MET:HG2	2.20	0.47
1:A:1322:PHE:O	1:A:1326:TRP:N	2.38	0.47
1:A:1445:ILE:C	1:A:1449:TRP:HD1	2.18	0.47
1:A:1529:MET:O	1:A:1532:TYR:N	2.47	0.47
1:A:1622:ARG:HD2	1:A:1622:ARG:HA	1.68	0.47
1:A:1591:VAL:HG22	1:A:1628:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:1650:MET:O	1:A:1654:LEU:HG	2.15	0.47
1:A:1732:ILE:HD11	1:A:1740:LYS:CD	2.44	0.47
1:A:1717:MET:HG2	1:A:1754:LEU:HG	1.97	0.47
1:A:1804:TYR:HB3	1:A:1873:LEU:HD12	1.97	0.47
1:A:2011:MET:O	1:A:2014:GLU:HB2	2.15	0.47
1:A:2128:PRO:CA	1:A:2131:LEU:HB3	2.34	0.47
1:A:2495:LYS:O	1:A:2498:ILE:HB	2.15	0.47
1:A:634:ILE:HG12	1:A:637:ILE:HD12	1.97	0.47
1:A:767:LEU:HD22	1:A:1112:HIS:CE1	91.28	0.47
1:A:795:ILE:O	1:A:798:VAL:HB	2.15	0.47
1:A:991:PRO:O	1:A:994:MET:HB2	2.15	0.47
2:B:1041:ALA:HB3	2:B:1047:CYS:H	1.79	0.47
3:C:18:ALA:HA	3:C:311:HIS:NE2	2.30	0.47
3:C:196:VAL:HB	3:C:214:THR:H	1.80	0.47
3:C:21:ASP:OD2	3:C:23:THR:OG1	2.29	0.47
3:C:224:LEU:HA	3:C:224:LEU:HD23	1.69	0.47
3:C:254:LEU:HD21	3:C:257:GLU:HB2	1.97	0.47
3:C:311:HIS:HB3	3:C:313:LYS:H	1.80	0.47
1:A:1016:LEU:HB3	1:A:1059:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:1139:VAL:HG13	1:A:1179:SER:CB	2.45	0.47
1:A:1354:THR:O	1:A:1357:LEU:N	2.48	0.47
1:A:1436:ALA:HB1	1:A:1440:PHE:O	2.15	0.47
1:A:1536:ILE:HG22	1:A:1537:PRO:O	2.15	0.47

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1658:SER:O	1:A:1662:LYS:HG3	2.15	0.47
1:A:1741:GLN:O	1:A:1744:HIS:HB2	2.15	0.47
1:A:1872:ASP:HA	1:A:1875:LYS:HD2	1.97	0.47
1:A:765:PRO:O	1:A:768:ILE:N	2.48	0.47
1:A:976:THR:CA	1:A:979:PHE:HD2	2.28	0.47
3:C:242:GLN:NE2	3:C:261:LYS:HA	2.30	0.47
3:C:67:MET:HB2	3:C:78:ILE:HB	1.96	0.47
3:C:84:VAL:HG21	3:C:88:ILE:CD1	2.44	0.47
1:A:1014:GLN:C	1:A:1018:MET:HG2	2.36	0.46
1:A:1187:LYS:O	1:A:1191:PHE:HB2	2.15	0.46
1:A:1481:MET:HE3	1:A:1493:LEU:HD12	2.06	0.46
1:A:1565:ASP:O	1:A:1568:ARG:HB2	2.15	0.46
1:A:2000:GLU:HG2	1:A:2001:HIS:ND1	2.30	0.46
1:A:2136:LEU:C	1:A:2138:LEU:H	2.19	0.46
1:A:2371:PHE:CD1	1:A:2542:TYR:HA	2.50	0.46
1:A:2375:ILE:HG13	1:A:2538:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:725:PHE:C	1:A:728:PRO:HD2	2.36	0.46
1:A:764:ALA:O	1:A:768:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:844:LEU:HA	1:A:847:LEU:HD12	1.97	0.46
2:B:86:CYS:HB2	2:B:119:TYR:HA	1.97	0.46
2:B:949:SER:O	2:B:1042:ASP:HB2	2.15	0.46
3:C:298:CYS:H	3:C:303:GLU:N	2.13	0.46
1:A:1018:MET:O	1:A:1021:SER:N	2.48	0.46
1:A:1102:LEU:HD23	1:A:1102:LEU:HA	1.71	0.46
1:A:1206:HIS:HB3	1:A:1207:GLN:HG3	1.96	0.46
1:A:1804:TYR:CE1	1:A:1876:THR:HG21	2.50	0.46
1:A:2008:GLN:HB3	1:A:2136:LEU:CD2	2.46	0.46
1:A:2136:LEU:O	1:A:2152:ARG:HD3	2.14	0.46
1:A:2175:MET:HA	1:A:2180:HIS:O	2.15	0.46
1:A:2180:HIS:HB2	1:A:2182:PHE:CE1	2.50	0.46
1:A:2246:LEU:HD12	1:A:2249:LEU:HB2	1.96	0.46
1:A:998:LEU:H	1:A:998:LEU:HG	1.22	0.46
2:B:1048:PHE:O	2:B:1056:LYS:HA	2.15	0.46
2:B:81:CYS:SG	2:B:144:GLU:HB2	2.55	0.46
3:C:56:MET:HB2	3:C:68:TYR:O	2.15	0.46
1:A:1141:ARG:HA	1:A:1144:GLU:HB2	1.97	0.46
1:A:1637:LEU:HA	1:A:1637:LEU:HD23	1.68	0.46
1:A:1956:LEU:O	1:A:1960:LEU:N	2.26	0.46
1:A:2204:LEU:O	1:A:2207:THR:N	2.49	0.46
1:A:608:ASP:HB2	1:A:612:ASN:HD22	1.81	0.46
1:A:636:LEU:HB2	1:A:672:ARG:CZ	2.45	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:643:VAL:HG12	1:A:644:VAL:N	2.31	0.46
1:A:976:THR:N	1:A:979:PHE:HD2	2.14	0.46
2:B:1094:ARG:HA	2:B:1117:ASP:O	2.15	0.46
2:B:1173:SER:O	2:B:1181:ILE:HA	2.15	0.46
3:C:143:LEU:HB3	3:C:155:TRP:HE3	1.80	0.46
3:C:21:ASP:HB3	3:C:311:HIS:CD2	2.50	0.46
3:C:67:MET:HG3	3:C:81:TYR:CE2	2.50	0.46
1:A:1614:ILE:HG22	1:A:1618:ILE:HG13	1.98	0.46
1:A:1643:VAL:HG13	1:A:1644:VAL:N	2.30	0.46
1:A:1672:THR:HG22	1:A:1676:LEU:HG	1.96	0.46
1:A:1907:LEU:HD23	1:A:1907:LEU:HA	1.69	0.46
1:A:1910:TRP:HE3	1:A:1923:LEU:HD13	1.81	0.46
1:A:2101:TRP:HB3	1:A:2105:TYR:CE2	2.51	0.46
1:A:2183:VAL:O	1:A:2239:TRP:N	2.46	0.46
1:A:691:GLU:HA	1:A:694:GLN:OE1	2.16	0.46
1:A:836:LYS:O	1:A:840:ALA:N	2.48	0.46
1:A:887:VAL:HA	1:A:890:LEU:HB2	1.97	0.46
1:A:943:LEU:HD22	1:A:951:SER:HB2	1.97	0.46
2:B:82:ALA:HB1	2:B:143:GLU:HB3	1.98	0.46
3:C:17:THR:HG23	3:C:315:VAL:HG11	1.98	0.46
1:A:1019:LEU:O	1:A:1023:VAL:N	2.29	0.46
1:A:1193:PRO:HA	1:A:1196:ASN:ND2	2.31	0.46
1:A:1405:GLN:HE21	1:A:2389:VAL:HG12	1.81	0.46
1:A:1451:GLU:HG3	1:A:1456:TRP:CZ3	2.51	0.46
1:A:1540:THR:HB	1:A:1543:GLY:N	2.26	0.46
1:A:1667:ALA:O	1:A:1671:LYS:HG3	2.15	0.46
1:A:2339:ARG:NH2	1:A:2356:ILE:O	2.48	0.46
1:A:2378:ARG:HD3	1:A:2380:THR:CG2	2.45	0.46
1:A:2411:LYS:HE3	1:A:2508:LEU:HB3	1.98	0.46
1:A:278:GLU:N	1:A:279:GLY:HA2	2.30	0.46
1:A:854:VAL:HA	1:A:857:PRO:HD2	1.98	0.46
2:B:111:GLU:N	2:B:114:GLN:HA	2.31	0.46
2:B:351:LEU:O	2:B:351:LEU:HD23	2.16	0.46
2:B:602:GLU:HA	2:B:603:LYS:CB	2.45	0.46
2:B:726:ILE:CB	2:B:727:ARG:HA	2.45	0.46
3:C:104:GLY:O	3:C:131:ILE:HD12	2.16	0.46
1:A:1014:GLN:O	1:A:1017:GLY:N	2.49	0.46
1:A:1162:THR:HG21	1:A:1173:ALA:HB2	1.98	0.46
1:A:1389:LYS:O	1:A:1393:TYR:CG	2.69	0.46
1:A:1420:ASN:HB3	1:A:1425:GLN:O	2.16	0.46
1:A:1876:THR:HA	1:A:1879:MET:HB3	1.97	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1915:HIS:CE1	1:A:1950:ARG:HH11	2.34	0.46
1:A:2005:LEU:HB2	1:A:2137:GLU:CD	2.36	0.46
1:A:2288:GLU:O	1:A:2292:ASN:N	2.24	0.46
1:A:2315:ASP:O	1:A:2318:THR:HB	2.16	0.46
1:A:2340:HIS:O	1:A:2342:SER:N	2.49	0.46
1:A:2344:LEU:HB2	1:A:2355:HIS:HA	1.98	0.46
1:A:629:LEU:O	1:A:632:PRO:HD2	2.16	0.46
1:A:908:GLN:HB2	1:A:1568:ARG:HH22	1.76	0.46
1:A:915:VAL:HA	1:A:916:SER:OG	2.16	0.46
2:B:1213:TRP:HB2	2:B:1215:VAL:HG12	1.98	0.46
3:C:136:LEU:HD23	3:C:140:GLN:NE2	2.31	0.46
3:C:227:ARG:HH12	3:C:278:PHE:N	2.14	0.46
1:A:1137:GLU:O	1:A:1140:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:1175:ASP:HA	1:A:1178:SER:OG	2.16	0.46
1:A:1192:ILE:HG22	1:A:1196:ASN:HD21	1.79	0.46
1:A:1385:GLU:CD	1:A:1396:ALA:HA	2.36	0.46
1:A:921:LYS:HE3	1:A:1627:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:1915:HIS:O	1:A:1952:LEU:HD22	2.15	0.46
1:A:2048:PHE:HB3	1:A:2052:GLU:CD	2.36	0.46
1:A:2115:LEU:HB3	1:A:2168:ARG:HH12	1.81	0.46
1:A:2378:ARG:HD3	1:A:2380:THR:HG22	1.98	0.46
1:A:661:VAL:HG21	1:A:669:PRO:HG3	1.97	0.46
1:A:836:LYS:O	1:A:839:VAL:HB	2.16	0.46
1:A:906:ILE:HG22	1:A:910:ARG:HG3	1.98	0.46
1:A:974:ALA:O	1:A:977:PHE:HB2	2.16	0.46
2:B:85:GLU:H	2:B:147:LEU:CG	2.28	0.46
3:C:174:THR:HG23	3:C:190:SER:HA	1.98	0.46
3:C:289:SER:N	3:C:315:VAL:O	2.49	0.46
1:A:1501:TRP:O	1:A:1501:TRP:CG	2.69	0.46
1:A:1501:TRP:HZ2	1:A:1509:GLN:HG3	1.81	0.46
1:A:1944:ALA:C	1:A:1987:ARG:HH12	2.20	0.46
1:A:1980:SER:HA	1:A:1995:LEU:HD11	1.98	0.46
1:A:2368:ARG:O	1:A:2372:PRO:HG3	2.16	0.46
1:A:2404:MET:HG3	1:A:2521:VAL:HG22	1.97	0.46
1:A:633:SER:O	1:A:637:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:706:GLU:O	1:A:710:LEU:N	2.35	0.46
1:A:876:GLN:HB3	1:A:880:THR:CG2	2.45	0.46
1:A:923:SER:O	1:A:926:SER:OG	2.33	0.46
1:A:972:VAL:HG13	1:A:975:ILE:HB	1.98	0.46
2:B:163:GLU:O	2:B:167:PHE:CG	2.69	0.46
2:B:207:LYS:HA	2:B:210:ALA:HB3	1.98	0.46

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
3:C:106:ASP:OD1	3:C:107:CYS:N	2.49	0.46
3:C:287:THR:O	3:C:294:ALA:HA	2.16	0.46
1:A:1207:GLN:O	1:A:1210:ASP:HB2	2.16	0.46
1:A:1381:VAL:HG11	1:A:1399:TYR:CE1	2.51	0.46
1:A:1480:ARG:NH1	1:A:1496:GLN:HE22	2.14	0.46
1:A:1494:HIS:HA	1:A:1519:ALA:HB1	1.97	0.46
1:A:1517:ALA:CA	1:A:1529:MET:HG3	2.46	0.46
1:A:1562:GLN:C	1:A:1566:LYS:HZ3	2.22	0.46
1:A:1633:TRP:N	1:A:1633:TRP:CD1	2.81	0.46
1:A:1795:VAL:HG12	1:A:1799:GLU:HG3	1.97	0.46
1:A:1808:ASN:HA	1:A:1811:ARG:HB2	1.98	0.46
1:A:1877:LEU:O	1:A:1881:THR:OG1	2.29	0.46
1:A:2010:MET:HG3	1:A:2014:GLU:HG3	1.98	0.46
1:A:2102:ASP:HA	1:A:2105:TYR:HB2	1.98	0.46
1:A:2366:MET:O	1:A:2372:PRO:HB3	2.16	0.46
1:A:2398:ILE:HA	1:A:2401:HIS:ND1	2.31	0.46
1:A:611:LEU:HA	1:A:614:GLU:HB2	1.98	0.46
1:A:791:ASN:N	1:A:792:PRO:HD2	2.31	0.46
1:A:828:LEU:H	1:A:828:LEU:HG	1.43	0.46
2:B:1042:ASP:C	2:B:1044:ASP:H	2.19	0.46
2:B:135:THR:HA	2:B:138:ARG:CB	2.42	0.46
2:B:210:ALA:O	2:B:213:ARG:N	2.49	0.46
2:B:191:ILE:O	2:B:264:THR:HA	2.16	0.46
2:B:346:LEU:O	2:B:350:PHE:N	2.45	0.46
3:C:18:ALA:O	3:C:315:VAL:HG13	2.16	0.46
3:C:273:MET:HB2	3:C:273:MET:HE2	1.85	0.46
3:C:283:GLN:O	3:C:299:VAL:N	2.49	0.46
3:C:295:ARG:HG2	3:C:307:GLU:CD	2.36	0.46
1:A:1096:LEU:HA	1:A:1096:LEU:HD23	1.72	0.46
1:A:1910:TRP:HD1	1:A:1911:PHE:CE1	2.34	0.46
1:A:1932:ILE:O	1:A:1936:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:1974:TYR:HA	1:A:1977:THR:HB	1.97	0.46
1:A:2348:ARG:HG3	1:A:2349:LEU:HG	1.98	0.46
1:A:913:SER:HA	1:A:1622:ARG:HH12	1.81	0.46
1:A:970:MET:HE1	1:A:973:GLN:HB2	2.01	0.46
1:A:982:LEU:HD23	1:A:982:LEU:HA	1.65	0.46
3:C:143:LEU:HB3	3:C:155:TRP:HB3	1.98	0.46
1:A:1187:LYS:HG3	1:A:1191:PHE:CD2	2.52	0.45
1:A:1514:ARG:HA	1:A:1536:ILE:CD1	2.46	0.45
1:A:1790:TRP:HB3	1:A:1891:SER:HA	1.99	0.45
1:A:2184:PHE:CD1	1:A:2238:GLY:HA2	2.51	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2339:ARG:NH1	1:A:2344:LEU:HB3	2.31	0.45
1:A:951:SER:HA	1:A:954:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:986:CYS:C	1:A:988:GLN:H	2.20	0.45
2:B:78:THR:N	2:B:81:CYS:O	2.50	0.45
3:C:133:CYS:HB3	3:C:175:SER:HA	1.98	0.45
1:A:1039:ARG:HH21	1:A:1063:LEU:HD22	1.81	0.45
1:A:1043:VAL:HA	1:A:1080:ARG:CZ	2.46	0.45
1:A:731:ARG:NH1	1:A:1149:THR:OG1	107.72	0.45
1:A:1211:VAL:HG12	1:A:1215:ARG:HE	1.81	0.45
1:A:1395:LYS:O	1:A:1399:TYR:HD2	1.99	0.45
1:A:1598:GLU:HA	1:A:1601:GLU:OE1	2.17	0.45
1:A:1936:LEU:HD22	1:A:1939:ILE:HD11	1.98	0.45
1:A:2254:ARG:O	1:A:2259:ILE:N	2.48	0.45
1:A:2301:LYS:HE3	1:A:2301:LYS:HB3	1.82	0.45
1:A:540:LEU:O	1:A:543:LEU:N	2.40	0.45
1:A:638:SER:C	1:A:640:HIS:HB2	2.37	0.45
1:A:738:LEU:HA	1:A:738:LEU:HD23	1.67	0.45
1:A:742:GLU:HA	1:A:745:GLY:HA3	1.98	0.45
1:A:750:LYS:HZ1	1:A:790:PRO:HA	1.80	0.45
1:A:870:ASN:HA	1:A:873:LYS:CD	2.46	0.45
2:B:389:CYS:O	2:B:392:GLN:N	2.49	0.45
2:B:427:ARG:O	2:B:431:GLU:HA	2.16	0.45
2:B:595:GLY:O	2:B:599:SER:N	2.24	0.45
3:C:109:ALA:HB3	3:C:125:PHE:HB3	1.97	0.45
3:C:147:ASP:OD2	3:C:151:ALA:HB3	2.16	0.45
3:C:192:GLY:HA2	3:C:223:ALA:N	2.31	0.45
3:C:226:CYS:HA	3:C:237:THR:HA	1.98	0.45
3:C:259:SER:OG	3:C:261:LYS:HB2	2.16	0.45
1:A:1123:ASP:OD1	1:A:1161:ARG:HD3	2.17	0.45
1:A:1380:ILE:HG12	1:A:1383:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:1533:THR:HG21	1:A:1550:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:2084:TRP:HB3	1:A:2096:ASP:O	2.17	0.45
1:A:2077:ASP:OD2	1:A:2107:VAL:HG13	2.17	0.45
1:A:700:LEU:HD23	1:A:700:LEU:HA	1.80	0.45
1:A:727:MET:CG	1:A:760:LEU:HD13	2.46	0.45
1:A:775:ILE:C	1:A:776:LEU:HG	2.37	0.45
2:B:1185:LEU:HB3	2:B:1187:ASP:OD1	2.17	0.45
3:C:192:GLY:HA2	3:C:223:ALA:CB	2.47	0.45
3:C:13:VAL:HG13	3:C:320:PHE:HE1	1.82	0.45
1:A:1171:SER:HA	1:A:1174:MET:HB2	1.98	0.45
1:A:1520:ALA:HB1	1:A:1525:GLN:HB2	1.98	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1769:ILE:O	1:A:1773:LEU:HG	2.16	0.45
1:A:2151:ILE:HG21	1:A:2182:PHE:HE2	1.81	0.45
1:A:2500:ILE:O	1:A:2504:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:649:VAL:O	1:A:653:ALA:N	2.40	0.45
2:B:1041:ALA:CB	2:B:1047:CYS:H	2.30	0.45
3:C:18:ALA:HB1	3:C:45:VAL:HG21	1.99	0.45
3:C:216:ILE:HD11	3:C:235:LEU:HD23	1.99	0.45
3:C:227:ARG:CD	3:C:276:CYS:H	2.30	0.45
1:A:1115:LEU:HA	1:A:1115:LEU:HD23	1.66	0.45
1:A:1473:ASP:H	1:A:1476:LEU:HD12	1.82	0.45
1:A:922:SER:OG	1:A:1583:TYR:CZ	2.69	0.45
1:A:1591:VAL:HG22	1:A:1628:ARG:CZ	2.46	0.45
1:A:1899:ASN:O	1:A:1902:ASP:N	2.48	0.45
1:A:2505:ARG:O	1:A:2509:THR:N	2.43	0.45
1:A:632:PRO:HA	1:A:635:HIS:CD2	2.52	0.45
1:A:851:THR:O	1:A:855:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:867:VAL:HG13	1:A:871:PHE:HE2	1.82	0.45
2:B:1101:ASP:HB2	2:B:1112:TRP:O	2.17	0.45
3:C:136:LEU:HD12	3:C:142:GLU:O	2.16	0.45
3:C:271:GLY:HA2	3:C:290:SER:CB	2.46	0.45
3:C:40:HIS:CE1	3:C:61:GLY:CA	3.00	0.45
1:A:1130:PRO:O	1:A:1133:LYS:N	2.49	0.45
1:A:1449:TRP:O	1:A:1452:LYS:N	2.49	0.45
1:A:1740:LYS:O	1:A:1743:LEU:HB3	2.17	0.45
1:A:1870:THR:O	1:A:1873:LEU:HB3	2.17	0.45
1:A:1873:LEU:HG	1:A:1877:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:1888:PHE:O	1:A:1892:ILE:N	2.33	0.45
1:A:1889:PHE:HA	1:A:1892:ILE:HB	1.98	0.45
1:A:1955:ARG:HG3	1:A:1956:LEU:N	2.32	0.45
1:A:2078:LEU:HA	1:A:2104:TYR:HE1	1.81	0.45
1:A:2260:LEU:HG	1:A:2266:ARG:NH1	2.32	0.45
1:A:2281:MET:HE3	1:A:2281:MET:HB3	1.80	0.45
1:A:2423:TYR:OH	1:A:2498:ILE:HA	2.17	0.45
1:A:280:GLU:HA	1:A:281:ARG:HA	1.46	0.45
1:A:609:HIS:HD2	1:A:612:ASN:ND2	2.15	0.45
1:A:730:LEU:HD11	1:A:746:ILE:HD12	1.98	0.45
1:A:747:GLY:HA2	1:A:750:LYS:CD	2.47	0.45
1:A:757:LEU:O	1:A:760:LEU:N	2.49	0.45
1:A:902:ASN:CA	1:A:905:MET:HB2	2.41	0.45
1:A:987:VAL:O	1:A:988:GLN:HB3	2.17	0.45
1:A:995:PRO:HA	1:A:998:LEU:HD12	1.98	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:470:VAL:HA	2:B:471:GLY:HA3	1.72	0.45
3:C:14:ILE:HD11	3:C:54:ARG:NH2	2.31	0.45
3:C:155:TRP:NE1	3:C:160:ASP:O	2.50	0.45
3:C:227:ARG:HH12	3:C:278:PHE:H	1.64	0.45
1:A:1039:ARG:HH12	1:A:1070:TYR:HD1	1.65	0.45
1:A:1383:LEU:O	1:A:1387:ALA:N	2.49	0.45
1:A:1548:ALA:HB2	1:A:1563:CYS:HB2	1.99	0.45
1:A:690:ALA:O	1:A:694:GLN:HG3	2.17	0.45
1:A:964:LEU:HD11	1:A:979:PHE:CZ	2.51	0.45
3:C:137:HIS:CB	3:C:142:GLU:HB2	2.47	0.45
3:C:246:ILE:O	3:C:254:LEU:HA	2.17	0.45
3:C:290:SER:HA	3:C:314:ALA:CB	2.47	0.45
1:A:1007:ALA:HB1	1:A:1012:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:1070:TYR:O	1:A:1073:GLN:N	2.50	0.45
1:A:1148:PHE:CB	1:A:1184:LEU:HD12	2.43	0.45
1:A:1397:LEU:HD13	1:A:1419:ILE:CG2	2.47	0.45
1:A:1577:ALA:C	1:A:1579:ALA:H	2.20	0.45
1:A:1704:MET:HG2	1:A:1709:ARG:O	2.17	0.45
1:A:341:GLY:C	1:A:344:GLY:H	2.20	0.45
1:A:895:ASP:OD1	1:A:895:ASP:N	2.49	0.45
1:A:914:ALA:O	1:A:915:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:957:ARG:HD2	1:A:992:GLN:HG2	1.99	0.45
2:B:1148:ARG:HB2	2:B:1150:TRP:HE1	1.82	0.45
2:B:111:GLU:CA	2:B:114:GLN:N	2.80	0.45
2:B:263:PHE:HE1	2:B:437:LEU:H	1.65	0.45
3:C:199:LEU:HD23	3:C:199:LEU:HA	1.74	0.45
1:A:1216:ILE:O	1:A:1220:TYR:N	2.50	0.45
1:A:1404:PHE:HA	1:A:1412:ILE:HD13	1.99	0.45
1:A:1475:GLU:H	1:A:1475:GLU:HG3	1.46	0.45
1:A:1481:MET:HE3	1:A:1493:LEU:HA	1.98	0.45
1:A:1649:ASP:OD2	1:A:1653:TRP:NE1	2.50	0.45
1:A:1930:ILE:HD13	1:A:1935:TRP:NE1	2.32	0.45
1:A:2076:ARG:HG3	1:A:2077:ASP:N	2.30	0.45
1:A:2262:ASN:O	1:A:2265:HIS:N	2.50	0.45
1:A:2313:TRP:CH2	1:A:2317:ARG:CZ	3.00	0.45
1:A:2345:MET:CG	1:A:2354:LEU:HB3	2.47	0.45
1:A:733:MET:HA	1:A:739:THR:HG21	1.98	0.45
1:A:749:ILE:HG23	1:A:752:GLN:OE1	2.17	0.45
2:B:902:PRO:HA	2:B:920:SER:HA	1.99	0.45
3:C:125:PHE:HB2	3:C:155:TRP:CZ2	2.52	0.45
1:A:1115:LEU:HD12	1:A:1151:TYR:CD2	2.51	0.45

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1410:PRO:O	1:A:1414:GLU:N	2.35	0.45
1:A:919:GLU:N	1:A:1627:GLN:HB2	2.32	0.45
1:A:1643:VAL:HG13	1:A:1644:VAL:H	1.81	0.45
1:A:1653:TRP:O	1:A:1656:TYR:HB3	2.17	0.45
1:A:2055:HIS:CE1	1:A:2082:GLN:HB2	2.52	0.45
1:A:2184:PHE:O	1:A:2185:LEU:HD12	2.17	0.45
1:A:2361:CYS:O	1:A:2364:VAL:HG23	2.17	0.45
1:A:2370:LYS:HE3	1:A:2371:PHE:CE2	2.52	0.45
1:A:2297:ASP:HA	1:A:2385:ASN:ND2	2.32	0.45
1:A:869:LEU:O	1:A:872:LEU:N	2.50	0.45
1:A:990:LEU:HD22	1:A:1030:TYR:CE2	2.45	0.45
3:C:241:ASP:O	3:C:242:GLN:HG2	2.17	0.45
1:A:1532:TYR:HA	1:A:1535:MET:HB2	1.99	0.44
1:A:1544:ALA:HB3	1:A:1567:ALA:HB2	1.98	0.44
1:A:1564:ILE:O	1:A:1568:ARG:HG3	2.17	0.44
1:A:1771:LYS:O	1:A:1774:GLN:HB3	2.18	0.44
1:A:1994:ILE:HA	1:A:1997:ASN:CB	2.45	0.44
1:A:1994:ILE:HG12	1:A:1997:ASN:HD22	1.82	0.44
1:A:2309:SER:O	1:A:2312:VAL:HB	2.17	0.44
1:A:2336:LEU:HD21	1:A:2339:ARG:NH2	2.25	0.44
1:A:2341:PRO:HD3	1:A:2378:ARG:HH12	1.82	0.44
1:A:865:LEU:O	1:A:869:LEU:HG	2.17	0.44
2:B:205:SER:HB2	2:B:209:PHE:CE2	2.52	0.44
3:C:288:ALA:HB1	3:C:315:VAL:HG12	1.99	0.44
3:C:92:GLY:O	3:C:101:TYR:N	2.46	0.44
1:A:1635:LYS:HA	1:A:1638:MET:SD	2.58	0.44
1:A:1712:ASP:OD1	1:A:1715:GLN:HB3	2.17	0.44
1:A:1783:ASP:HB3	1:A:1786:TRP:HB2	1.99	0.44
1:A:1900:LEU:HB2	1:A:1937:GLN:NE2	2.33	0.44
1:A:2183:VAL:C	1:A:2184:PHE:HD1	2.21	0.44
1:A:2278:LEU:HB2	1:A:2283:LYS:HG3	1.99	0.44
1:A:2356:ILE:HA	1:A:2358:PHE:CE2	2.52	0.44
1:A:287:GLU:O	1:A:291:GLN:N	2.50	0.44
1:A:924:GLN:O	1:A:927:SER:OG	2.33	0.44
2:B:372:PRO:HA	2:B:373:THR:HA	1.65	0.44
3:C:139:ASN:HD21	3:C:142:GLU:CD	2.21	0.44
3:C:179:ASP:HB3	3:C:228:PHE:CG	2.52	0.44
1:A:1097:LEU:O	1:A:1101:GLN:HG3	2.18	0.44
1:A:1134:ALA:O	1:A:1138:THR:HG23	2.18	0.44
1:A:1490:TRP:CE3	1:A:1493:LEU:HD23	2.52	0.44
1:A:1800:ALA:O	1:A:1804:TYR:HD2	2.00	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2012:VAL:O	1:A:2016:LEU:N	2.42	0.44
1:A:2036:ARG:HD3	1:A:2036:ARG:HA	1.81	0.44
1:A:2193:ARG:HA	1:A:2196:GLU:OE1	2.17	0.44
1:A:2521:VAL:HB	1:A:2522:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:693:LEU:O	1:A:696:LEU:N	2.50	0.44
1:A:697:PHE:CG	1:A:708:ARG:HD2	2.52	0.44
1:A:844:LEU:O	1:A:845:GLY:C	2.56	0.44
2:B:133:LEU:H	2:B:133:LEU:HG	1.64	0.44
1:A:1038:MET:HA	1:A:1041:PHE:HD2	1.83	0.44
1:A:1055:LEU:O	1:A:1058:GLN:N	2.51	0.44
1:A:1479:GLY:HA2	1:A:1482:ARG:HB2	2.00	0.44
1:A:1656:TYR:O	1:A:1660:CYS:N	2.33	0.44
1:A:1679:VAL:HG21	1:A:1690:PRO:CG	2.48	0.44
1:A:1932:ILE:HD13	1:A:1968:HIS:CE1	2.52	0.44
1:A:2078:LEU:HA	1:A:2104:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:2065:LEU:HD12	1:A:2125:TYR:HA	1.99	0.44
1:A:2140:VAL:HB	1:A:2143:THR:OG1	2.18	0.44
2:B:195:ASP:H	2:B:267:LEU:CG	2.30	0.44
3:C:238:CYS:HA	3:C:273:MET:HG3	1.99	0.44
1:A:973:GLN:HG2	1:A:1014:GLN:OE1	2.18	0.44
1:A:1179:SER:HA	1:A:1182:PHE:HD2	1.82	0.44
1:A:1878:LEU:HD21	1:A:1918:ASP:CB	2.47	0.44
1:A:2503:ARG:HA	1:A:2506:ASP:HB2	1.99	0.44
1:A:331:VAL:HA	1:A:332:GLY:HA2	1.71	0.44
1:A:864:LEU:HB2	1:A:910:ARG:NH2	2.33	0.44
1:A:755:ARG:HH21	2:B:479:LEU:C	130.27	0.44
3:C:12:PRO:HA	3:C:54:ARG:NH1	2.22	0.44
1:A:1435:TYR:O	1:A:1438:LYS:N	2.51	0.44
1:A:1806:HIS:HA	1:A:1809:GLN:HB2	2.00	0.44
1:A:2310:SER:O	1:A:2313:TRP:HB3	2.18	0.44
1:A:2354:LEU:HG	1:A:2355:HIS:N	2.33	0.44
1:A:862:PRO:HA	1:A:865:LEU:HD12	2.00	0.44
1:A:890:LEU:O	1:A:893:ALA:HB3	2.18	0.44
2:B:1231:SER:N	2:B:1240:ASP:O	2.51	0.44
2:B:424:VAL:CG1	2:B:426:ASN:CG	2.86	0.44
2:B:747:GLU:HA	2:B:751:ALA:H	1.83	0.44
2:B:810:GLN:HB3	2:B:812:TRP:NE1	2.33	0.44
1:A:1014:GLN:O	1:A:1015:GLN:C	2.56	0.44
1:A:1112:HIS:HA	1:A:1151:TYR:OH	2.18	0.44
1:A:1798:PHE:CE2	1:A:1802:LEU:HD11	2.53	0.44
1:A:1994:ILE:HA	1:A:1997:ASN:ND2	2.32	0.44

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2042:ARG:HA	1:A:2042:ARG:HD3	1.84	0.44
1:A:2141:PRO:CB	1:A:2236:LEU:HD13	2.44	0.44
1:A:2338:ASP:OD1	1:A:2545:TRP:HD1	2.01	0.44
1:A:957:ARG:HD2	1:A:992:GLN:HB3	1.99	0.44
3:C:277:ALA:HB3	3:C:286:VAL:H	1.83	0.44
1:A:1070:TYR:C	1:A:1074:LEU:HG	2.38	0.44
1:A:1176:THR:OG1	1:A:1177:LEU:N	2.50	0.44
1:A:1491:GLY:O	1:A:1494:HIS:HB3	2.18	0.44
1:A:1531:GLU:O	1:A:1534:CYS:HB2	2.18	0.44
1:A:1669:ALA:O	1:A:1673:LEU:HG	2.17	0.44
1:A:1899:ASN:HD22	1:A:1934:THR:HG23	1.83	0.44
1:A:2522:PRO:O	1:A:2525:VAL:HB	2.18	0.44
1:A:620:MET:O	1:A:624:ARG:N	2.40	0.44
1:A:757:LEU:HA	1:A:757:LEU:HD23	1.76	0.44
1:A:759:HIS:HA	1:A:762:SER:OG	2.18	0.44
1:A:861:TYR:HD2	1:A:898:LYS:NZ	2.15	0.44
1:A:868:LEU:HD23	1:A:868:LEU:HA	1.73	0.44
2:B:1049:TRP:HB3	2:B:1054:GLY:O	2.18	0.44
2:B:676:SER:O	2:B:680:THR:N	2.51	0.44
3:C:133:CYS:SG	3:C:146:GLY:N	2.91	0.44
1:A:1023:VAL:HG12	1:A:1066:GLU:OE2	2.18	0.44
1:A:1078:MET:HB3	1:A:1110:TYR:CE2	2.53	0.44
1:A:1907:LEU:HA	1:A:1910:TRP:HB3	2.00	0.44
1:A:2062:PRO:HG3	1:A:2071:ASN:HD22	1.83	0.44
1:A:2160:LEU:HA	1:A:2160:LEU:HD23	1.89	0.44
1:A:2332:TYR:OH	1:A:2507:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:2524:GLN:O	1:A:2528:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:2254:ARG:NH2	1:A:2549:TRP:NE1	2.66	0.44
1:A:634:ILE:HA	1:A:637:ILE:HB	2.00	0.44
1:A:918:SER:CB	1:A:921:LYS:HD2	2.47	0.44
2:B:210:ALA:O	2:B:211:LEU:C	2.56	0.44
2:B:646:MET:HA	2:B:647:MET:CB	2.48	0.44
3:C:175:SER:H	3:C:188:VAL:HG13	1.83	0.44
3:C:50:VAL:HB	3:C:321:ASN:HD22	1.83	0.44
1:A:997:PHE:CE2	1:A:1030:TYR:CD1	3.06	0.43
1:A:1170:ARG:HH21	1:A:1204:ILE:HG23	1.83	0.43
1:A:1448:THR:O	1:A:1451:GLU:HB3	2.18	0.43
1:A:1704:MET:HA	1:A:1707:SER:HB2	2.00	0.43
1:A:1960:LEU:O	1:A:1964:ILE:N	2.47	0.43
1:A:2031:LEU:HA	1:A:2031:LEU:HD23	1.88	0.43
1:A:2154:GLN:HB3	1:A:2175:MET:CG	2.48	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:601:GLN:HG2	1:A:604:ARG:HD2	1.99	0.43
1:A:668:ASP:O	1:A:671:ILE:N	2.51	0.43
1:A:633:SER:HA	1:A:672:ARG:HH12	1.83	0.43
1:A:767:LEU:O	1:A:771:TYR:CE2	2.71	0.43
3:C:98:ARG:NE	3:C:115:ARG:HB2	2.33	0.43
3:C:103:GLY:H	3:C:134:VAL:HG21	1.83	0.43
3:C:223:ALA:HA	3:C:239:SER:HA	2.00	0.43
3:C:50:VAL:HG21	3:C:70:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:1028:ARG:HD3	1:A:1032:ASP:CG	2.38	0.43
1:A:1262:THR:O	1:A:1265:LEU:N	2.51	0.43
1:A:1552:LEU:HD23	1:A:1552:LEU:HA	1.80	0.43
1:A:1555:ASP:O	1:A:1556:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:1552:LEU:HD12	1:A:1599:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:1634:GLN:O	1:A:1637:LEU:N	2.52	0.43
1:A:1872:ASP:O	1:A:1875:LYS:HB2	2.18	0.43
1:A:1969:PRO:HG2	1:A:1970:GLN:NE2	2.33	0.43
1:A:2192:LEU:HD13	1:A:2227:VAL:HG13	2.01	0.43
1:A:2332:TYR:HB2	1:A:2377:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:726:VAL:C	1:A:728:PRO:HD2	2.39	0.43
1:A:900:LYS:O	1:A:902:ASN:N	2.51	0.43
1:A:907:ASP:HA	1:A:910:ARG:HB2	1.99	0.43
1:A:919:GLU:OE2	1:A:1628:ARG:HA	2.18	0.43
1:A:968:HIS:HB2	1:A:970:MET:O	2.19	0.43
2:B:82:ALA:H	2:B:115:PRO:HB3	1.83	0.43
3:C:222:TYR:HB2	3:C:240:ALA:CB	2.48	0.43
3:C:292:ASN:HA	3:C:313:LYS:O	2.18	0.43
1:A:1180:LEU:H	1:A:1180:LEU:HG	1.47	0.43
1:A:1188:TYR:HD2	1:A:1189:GLN:HG3	1.83	0.43
1:A:1695:GLN:O	1:A:1698:TYR:HB3	2.19	0.43
1:A:1766:GLU:OE1	1:A:1804:TYR:CZ	2.71	0.43
1:A:1990:ALA:O	1:A:1993:LYS:HB3	2.18	0.43
1:A:2108:PHE:HA	1:A:2111:ILE:HB	2.01	0.43
1:A:2110:ARG:HB3	1:A:2114:GLN:NE2	2.33	0.43
1:A:636:LEU:CD1	1:A:656:LEU:HD13	2.48	0.43
1:A:886:ARG:C	1:A:890:LEU:HG	2.39	0.43
2:B:810:GLN:HB3	2:B:812:TRP:HE1	1.83	0.43
3:C:186:ALA:HA	3:C:195:TYR:O	2.18	0.43
3:C:196:VAL:HG11	3:C:252:PHE:CZ	2.53	0.43
3:C:247:TRP:HB3	3:C:252:PHE:HA	2.01	0.43
3:C:53:ASP:OD2	3:C:97:GLY:HA3	2.18	0.43
1:A:1082:PHE:CE1	1:A:1117:PRO:HG3	2.54	0.43

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1106:ASN:CB	1:A:1107:LEU:HB2	2.45	0.43
1:A:1208:ARG:HA	1:A:1211:VAL:HB	2.01	0.43
1:A:1651:ARG:HG3	1:A:1652:THR:H	1.84	0.43
1:A:1913:TYR:HB3	1:A:1919:VAL:HG21	2.01	0.43
1:A:1922:ALA:HA	1:A:1925:GLU:HB2	2.00	0.43
1:A:2139:ALA:HA	1:A:2151:ILE:O	2.19	0.43
1:A:2251:ARG:O	1:A:2255:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:2363:GLU:O	1:A:2366:MET:N	2.51	0.43
1:A:2394:GLY:O	1:A:2395:ASN:C	2.57	0.43
1:A:773:GLU:N	1:A:774:PRO:HD2	2.32	0.43
1:A:842:TRP:O	1:A:843:THR:OG1	2.32	0.43
1:A:861:TYR:CD2	1:A:898:LYS:NZ	2.82	0.43
2:B:86:CYS:HA	2:B:149:HIS:HB3	2.01	0.43
3:C:149:SER:O	3:C:170:GLU:N	2.52	0.43
3:C:65:ILE:HG22	3:C:66:ARG:N	2.34	0.43
1:A:1038:MET:O	1:A:1042:TRP:N	2.49	0.43
1:A:1153:SER:O	1:A:1157:HIS:N	2.33	0.43
1:A:1417:ILE:HG22	1:A:1432:VAL:HG11	2.00	0.43
1:A:1795:VAL:HG22	1:A:1888:PHE:HE1	1.84	0.43
1:A:1878:LEU:CD1	1:A:1919:VAL:HG23	2.49	0.43
1:A:2192:LEU:HD12	1:A:2229:PRO:N	2.34	0.43
1:A:2262:ASN:O	1:A:2266:ARG:N	2.25	0.43
1:A:2299:LEU:CD2	1:A:2386:ALA:HB2	2.48	0.43
1:A:606:CYS:CB	1:A:607:ALA:HA	2.43	0.43
1:A:947:TYR:HA	1:A:948:PRO:HD2	1.87	0.43
1:A:985:LYS:O	1:A:987:VAL:HG23	2.18	0.43
2:B:200:GLY:O	2:B:204:LYS:HG3	2.19	0.43
2:B:477:LEU:O	2:B:480:LEU:N	2.52	0.43
3:C:242:GLN:HA	3:C:273:MET:H	1.84	0.43
3:C:274:TRP:HD1	3:C:288:ALA:O	2.02	0.43
1:A:1180:LEU:O	1:A:1181:VAL:C	2.57	0.43
1:A:1878:LEU:HD12	1:A:1919:VAL:HG23	2.01	0.43
1:A:1977:THR:HG23	1:A:2010:MET:HE1	2.00	0.43
1:A:2015:GLU:HB2	1:A:2130:LEU:HG	2.01	0.43
1:A:2035:SER:O	1:A:2039:PHE:N	2.33	0.43
1:A:2062:PRO:HG3	1:A:2071:ASN:ND2	2.34	0.43
1:A:2170:ARG:O	1:A:2186:LEU:N	2.52	0.43
1:A:2311:GLU:CG	1:A:2312:VAL:H	2.29	0.43
1:A:2341:PRO:HD3	1:A:2378:ARG:NH1	2.34	0.43
1:A:2345:MET:O	1:A:2346:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:2345:MET:SD	1:A:2354:LEU:HD23	2.59	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2402:THR:O	1:A:2406:VAL:HG23	2.19	0.43
1:A:777:LYS:HZ3	1:A:821:PHE:HB2	1.86	0.43
1:A:832:SER:CB	1:A:836:LYS:HE3	2.49	0.43
1:A:916:SER:HB3	1:A:1594:HIS:CE1	2.53	0.43
2:B:1233:ASN:O	2:B:1239:PHE:HE1	2.02	0.43
2:B:426:ASN:O	2:B:431:GLU:HG2	2.18	0.43
2:B:900:ASP:HA	2:B:922:GLN:HA	2.00	0.43
3:C:23:THR:HG22	3:C:39:GLN:OE1	2.19	0.43
3:C:36:ARG:HH21	3:C:70:LEU:HA	1.83	0.43
1:A:1075:ILE:HG13	1:A:1078:MET:HB2	2.00	0.43
1:A:1141:ARG:O	1:A:1144:GLU:N	2.52	0.43
1:A:1393:TYR:CE1	1:A:1422:LYS:HB3	2.53	0.43
1:A:1551:ALA:HB1	1:A:1556:LEU:HB2	2.01	0.43
1:A:1777:SER:O	1:A:1781:GLU:HG2	2.19	0.43
1:A:1798:PHE:HE2	1:A:1905:ARG:HH11	1.67	0.43
1:A:1988:HIS:HD2	1:A:1992:ASN:ND2	2.12	0.43
1:A:2094:VAL:O	1:A:2097:LEU:N	2.52	0.43
1:A:2217:ARG:HA	1:A:2217:ARG:HD3	1.88	0.43
1:A:2279:THR:O	1:A:2282:GLN:HB2	2.19	0.43
1:A:2297:ASP:CG	1:A:2301:LYS:HD2	2.39	0.43
1:A:975:ILE:C	1:A:979:PHE:HD2	2.22	0.43
3:C:141:ALA:HA	3:C:157:LEU:HD12	2.01	0.43
3:C:142:GLU:HG3	3:C:206:GLU:HG2	1.99	0.43
3:C:65:ILE:HG22	3:C:66:ARG:H	1.84	0.43
1:A:1188:TYR:CD2	1:A:1220:TYR:HE2	2.37	0.43
1:A:1487:LEU:HA	1:A:1665:ARG:HH22	1.84	0.43
1:A:2088:TYR:CG	1:A:2097:LEU:HB2	2.53	0.43
1:A:2344:LEU:CB	1:A:2355:HIS:HA	2.49	0.43
1:A:2530:LYS:HD2	1:A:2530:LYS:HA	1.81	0.43
1:A:402:PHE:HA	1:A:403:ARG:C	2.39	0.43
1:A:902:ASN:O	1:A:905:MET:HB2	2.18	0.43
1:A:916:SER:HB2	1:A:1626:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:959:PHE:CD2	1:A:959:PHE:N	2.86	0.43
1:A:960:ARG:O	1:A:963:SER:OG	2.24	0.43
1:A:993:VAL:HB	1:A:1030:TYR:CZ	2.54	0.43
2:B:189:PRO:O	2:B:262:LEU:HA	2.18	0.43
3:C:177:HIS:CD2	3:C:178:ILE:H	2.36	0.43
3:C:297:TRP:CZ3	3:C:304:ILE:HG13	2.54	0.43
3:C:51:THR:HG1	3:C:55:SER:H	1.67	0.43
1:A:1278:ASP:O	1:A:1282:GLU:N	2.28	0.43
1:A:1593:CYS:O	1:A:1594:HIS:C	2.56	0.43

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1627:GLN:O	1:A:1628:ARG:HG2	2.19	0.43
1:A:1938:VAL:O	1:A:1938:VAL:HG12	2.19	0.43
1:A:1938:VAL:CG1	1:A:1941:GLN:HB2	2.48	0.43
1:A:2020:ALA:CB	1:A:2186:LEU:HD21	2.49	0.43
1:A:2302:LEU:HD13	1:A:2306:LYS:HD3	2.01	0.43
1:A:2314:PHE:O	1:A:2317:ARG:HB3	2.18	0.43
1:A:2422:VAL:HG12	1:A:2497:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:947:TYR:HB2	1:A:950:VAL:HB	2.00	0.43
1:A:960:ARG:NH2	1:A:978:ILE:O	2.52	0.43
2:B:189:PRO:HG2	2:B:262:LEU:HA	2.01	0.43
3:C:227:ARG:HD2	3:C:276:CYS:H	1.84	0.43
3:C:277:ALA:N	3:C:285:ILE:HG13	2.34	0.43
3:C:26:PHE:CD2	3:C:36:ARG:HG3	2.54	0.43
3:C:67:MET:CB	3:C:78:ILE:HB	2.49	0.43
1:A:1691:THR:HG22	1:A:1691:THR:O	2.18	0.43
1:A:1875:LYS:O	1:A:1878:LEU:N	2.52	0.43
1:A:1939:ILE:O	1:A:1943:ILE:HG13	2.19	0.43
1:A:2012:VAL:HG12	1:A:2016:LEU:CG	2.49	0.43
1:A:2392:LEU:O	1:A:2396:TYR:HB3	2.19	0.43
1:A:2536:GLU:HA	1:A:2539:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:637:ILE:HG13	1:A:672:ARG:HH21	1.84	0.43
2:B:1127:MET:HB3	2:B:1170:THR:O	2.19	0.43
2:B:340:ASP:CG	2:B:341:LEU:H	2.23	0.43
2:B:444:VAL:O	2:B:445:HIS:C	2.56	0.43
2:B:466:LEU:HA	2:B:467:ALA:HA	1.89	0.43
3:C:100:MET:O	3:C:112:TRP:HB2	2.19	0.43
3:C:64:HIS:CD2	3:C:66:ARG:HG3	2.50	0.43
1:A:1025:SER:OG	1:A:1026:HIS:CE1	2.72	0.42
1:A:1037:LEU:O	1:A:1040:GLU:N	2.52	0.42
1:A:1198:VAL:HG12	1:A:1199:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:1265:LEU:O	1:A:1268:ALA:HB2	2.19	0.42
1:A:1451:GLU:O	1:A:1454:HIS:N	2.50	0.42
1:A:1550:LEU:HA	1:A:1550:LEU:HD23	1.66	0.42
1:A:912:ALA:CB	1:A:1597:SER:HB3	2.49	0.42
1:A:1988:HIS:O	1:A:1992:ASN:N	2.28	0.42
1:A:2050:VAL:HG12	1:A:2051:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:2078:LEU:O	1:A:2082:GLN:N	2.49	0.42
1:A:2174:LEU:HB2	1:A:2182:PHE:HB2	2.00	0.42
1:A:2305:LEU:H	1:A:2305:LEU:HG	1.59	0.42
1:A:717:ARG:NH2	1:A:748:ARG:HH11	2.17	0.42
3:C:61:GLY:HA3	3:C:64:HIS:NE2	2.34	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1028:ARG:HG3	1:A:1029:PRO:N	2.35	0.42
1:A:1048:ILE:H	1:A:1084:HIS:CE1	2.37	0.42
1:A:1170:ARG:HH21	1:A:1204:ILE:HA	1.84	0.42
1:A:1174:MET:HE1	1:A:1207:GLN:H	1.84	0.42
1:A:1445:ILE:O	1:A:1449:TRP:CD1	2.68	0.42
1:A:1483:CYS:O	1:A:1487:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:1513:ALA:HB1	1:A:1532:TYR:O	2.19	0.42
1:A:1559:LEU:O	1:A:1562:GLN:N	2.52	0.42
1:A:1605:TYR:CD1	1:A:1615:ILE:HD12	2.53	0.42
1:A:1756:GLU:O	1:A:1759:LEU:HB2	2.19	0.42
1:A:1956:LEU:HA	1:A:1959:GLN:OE1	2.19	0.42
1:A:1980:SER:O	1:A:1988:HIS:HB2	2.19	0.42
1:A:2251:ARG:HA	1:A:2254:ARG:HB2	2.01	0.42
1:A:847:LEU:HG	1:A:847:LEU:H	1.59	0.42
1:A:888:LEU:HD23	1:A:888:LEU:HA	1.80	0.42
2:B:1143:ASP:C	2:B:1145:ARG:H	2.21	0.42
3:C:177:HIS:CE1	3:C:227:ARG:HA	2.54	0.42
3:C:238:CYS:HB3	3:C:273:MET:O	2.19	0.42
3:C:67:MET:O	3:C:78:ILE:N	2.44	0.42
1:A:1122:PHE:CB	1:A:1161:ARG:HD2	2.49	0.42
1:A:1373:PRO:O	1:A:1375:ARG:N	2.52	0.42
1:A:1446:GLN:HA	1:A:1449:TRP:CD1	2.55	0.42
1:A:1523:LEU:HA	1:A:1523:LEU:HD23	1.74	0.42
1:A:1540:THR:HG22	1:A:1541:HIS:N	2.35	0.42
1:A:1797:ASN:O	1:A:1801:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:1808:ASN:CB	1:A:1873:LEU:HD21	2.50	0.42
1:A:1936:LEU:HA	1:A:1939:ILE:CG1	2.49	0.42
1:A:1956:LEU:HA	1:A:1959:GLN:CB	2.43	0.42
1:A:2183:VAL:O	1:A:2184:PHE:HD1	2.02	0.42
1:A:2288:GLU:OE1	3:C:272:TRP:CZ2	2.72	0.42
3:C:173:ILE:HB	3:C:187:ALA:HB1	2.01	0.42
1:A:1218:LYS:HA	1:A:1221:THR:OG1	2.19	0.42
1:A:1613:GLU:HA	1:A:1616:ARG:HH11	1.85	0.42
1:A:1619:TRP:HB3	1:A:1640:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:1784:ARG:HD3	1:A:1790:TRP:CZ2	2.54	0.42
1:A:1910:TRP:CH2	1:A:1956:LEU:HD22	2.55	0.42
1:A:1992:ASN:HA	1:A:1995:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:2243:CYS:HA	1:A:2346:LEU:O	2.19	0.42
1:A:2247:HIS:HB2	1:A:2342:SER:N	2.34	0.42
1:A:774:PRO:HA	1:A:1079:LEU:HD22	63.00	0.42
1:A:867:VAL:HG13	1:A:871:PHE:CE2	2.54	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:990:LEU:C	1:A:1030:TYR:OH	2.57	0.42
2:B:627:VAL:C	2:B:630:SER:H	2.22	0.42
3:C:26:PHE:O	3:C:35:THR:N	2.52	0.42
1:A:1566:LYS:HE2	1:A:1566:LYS:HB2	1.74	0.42
1:A:1697:THR:HG22	1:A:1701:MET:SD	2.60	0.42
1:A:2266:ARG:HG2	1:A:2270:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:2529:ILE:O	1:A:2533:THR:N	2.53	0.42
2:B:191:ILE:HB	2:B:264:THR:HA	2.02	0.42
3:C:87:ASN:HB2	3:C:105:GLU:CD	2.40	0.42
3:C:312:GLN:OE1	3:C:312:GLN:N	2.53	0.42
1:A:999:ASN:O	1:A:1002:ARG:N	2.53	0.42
1:A:1538:ARG:HG2	1:A:1547:ARG:CD	2.50	0.42
1:A:1612:ARG:O	1:A:1615:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:1795:VAL:CG2	1:A:1888:PHE:HE1	2.33	0.42
1:A:2071:ASN:HA	1:A:2075:GLY:HA3	2.02	0.42
1:A:2080:GLU:O	1:A:2084:TRP:HD1	2.03	0.42
1:A:2201:LEU:O	1:A:2205:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:2398:ILE:O	1:A:2401:HIS:HB2	2.20	0.42
1:A:379:LYS:O	1:A:383:SER:N	2.53	0.42
1:A:594:PHE:CE2	1:A:631:THR:HG21	2.55	0.42
1:A:915:VAL:HG13	1:A:916:SER:O	2.20	0.42
1:A:975:ILE:HG22	1:A:979:PHE:CD2	2.55	0.42
2:B:919:HIS:HA	2:B:930:PHE:O	2.20	0.42
3:C:18:ALA:N	3:C:317:CYS:O	2.47	0.42
1:A:1073:GLN:O	1:A:1076:PRO:HD2	2.20	0.42
1:A:1178:SER:O	1:A:1181:VAL:N	2.53	0.42
1:A:1450:TYR:CD1	1:A:1453:LEU:HD12	2.53	0.42
1:A:1529:MET:CE	1:A:1550:LEU:HD21	2.50	0.42
1:A:1617:GLN:O	1:A:1620:TRP:HB3	2.19	0.42
1:A:1728:ALA:HB2	1:A:1743:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:1921:GLU:O	1:A:1925:GLU:HG2	2.20	0.42
1:A:2315:ASP:N	1:A:2315:ASP:OD1	2.52	0.42
1:A:2542:TYR:O	1:A:2545:TRP:HB3	2.20	0.42
2:B:1189:SER:HA	2:B:1221:LYS:HA	2.01	0.42
2:B:891:ASP:O	2:B:903:SER:HA	2.20	0.42
3:C:20:TYR:HB2	3:C:313:LYS:CB	2.49	0.42
1:A:1074:LEU:HA	1:A:1074:LEU:HD23	1.71	0.42
1:A:1080:ARG:O	1:A:1083:MET:HB2	2.20	0.42
1:A:1433:LEU:O	1:A:1437:MET:HG3	2.20	0.42
1:A:1597:SER:O	1:A:1601:GLU:N	2.52	0.42
1:A:1612:ARG:O	1:A:1615:ILE:N	2.34	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1637:LEU:HD23	1:A:1640:ARG:HD2	2.02	0.42
1:A:1602:VAL:HG13	1:A:1643:VAL:HB	2.01	0.42
1:A:1681:PRO:HG2	1:A:1683:ARG:HD2	2.01	0.42
1:A:1685:LEU:HD11	1:A:1712:ASP:HB2	2.02	0.42
1:A:1702:LYS:O	1:A:1705:TRP:HB3	2.20	0.42
1:A:2083:GLU:CG	1:A:2087:LYS:HE3	2.47	0.42
1:A:2303:LEU:HA	1:A:2303:LEU:HD23	1.77	0.42
1:A:639:GLY:O	1:A:676:LEU:HD21	2.20	0.42
1:A:735:ILE:H	1:A:738:LEU:CD1	2.21	0.42
1:A:829:GLN:H	1:A:829:GLN:HG3	1.45	0.42
1:A:917:LEU:HD11	1:A:1590:MET:HG3	2.01	0.42
1:A:766:ARG:HH22	2:B:455:ARG:HA	98.44	0.42
3:C:62:TYR:HA	3:C:87:ASN:HA	2.01	0.42
1:A:1015:GLN:HA	1:A:1018:MET:HB2	2.02	0.42
1:A:1037:LEU:O	1:A:1040:GLU:HB2	2.20	0.42
1:A:905:MET:C	1:A:1568:ARG:HH21	2.21	0.42
1:A:1881:THR:HG23	1:A:1909:LEU:HD13	2.02	0.42
1:A:1972:LEU:HB3	1:A:1976:LEU:HD12	2.02	0.42
1:A:2316:ARG:NH2	1:A:2349:LEU:HA	2.35	0.42
1:A:314:THR:HA	1:A:322:VAL:HA	2.02	0.42
1:A:566:ALA:HA	1:A:603:VAL:HG22	2.02	0.42
1:A:613:SER:HA	1:A:616:LYS:CE	2.50	0.42
1:A:640:HIS:NE2	1:A:672:ARG:HG2	2.35	0.42
1:A:727:MET:N	1:A:728:PRO:HD2	2.35	0.42
1:A:891:LEU:O	1:A:892:GLY:C	2.57	0.42
1:A:907:ASP:O	1:A:910:ARG:HB2	2.20	0.42
1:A:963:SER:HA	1:A:966:HIS:HD2	1.85	0.42
2:B:208:GLN:O	2:B:211:LEU:HB2	2.20	0.42
3:C:127:VAL:HB	3:C:153:HIS:CE1	2.55	0.42
3:C:222:TYR:O	3:C:240:ALA:N	2.39	0.42
3:C:27:TRP:CE2	3:C:308:TYR:HB3	2.54	0.42
1:A:1019:LEU:HA	1:A:1019:LEU:HD23	1.90	0.42
1:A:1204:ILE:O	1:A:1206:HIS:CD2	2.73	0.42
1:A:1597:SER:O	1:A:1600:GLU:N	2.53	0.42
1:A:1956:LEU:CA	1:A:1959:GLN:HB3	2.44	0.42
1:A:2012:VAL:C	1:A:2016:LEU:HG	2.40	0.42
1:A:2048:PHE:O	1:A:2052:GLU:HG2	2.20	0.42
1:A:2282:GLN:O	1:A:2286:VAL:N	2.39	0.42
1:A:2297:ASP:OD2	1:A:2301:LYS:HD2	2.20	0.42
1:A:2379:LEU:HD21	1:A:2392:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:2503:ARG:NH1	1:A:2512:ASP:HB2	2.34	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:633:SER:HA	1:A:672:ARG:HH22	1.85	0.42
1:A:704:VAL:HG12	1:A:708:ARG:NH2	2.35	0.42
1:A:727:MET:CE	1:A:760:LEU:HB3	2.50	0.42
1:A:2278:LEU:HA	3:C:44:GLN:OE1	2.20	0.42
1:A:1110:TYR:C	1:A:1112:HIS:N	2.72	0.41
1:A:1385:GLU:HB3	1:A:1396:ALA:CB	2.47	0.41
1:A:1481:MET:HA	1:A:1484:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:2302:LEU:HD12	1:A:2303:LEU:HG	2.01	0.41
1:A:2315:ASP:O	1:A:2319:ASN:N	2.35	0.41
1:A:737:ILE:HG23	1:A:740:GLU:OE1	2.20	0.41
1:A:783:LEU:HD23	1:A:783:LEU:HA	1.80	0.41
1:A:915:VAL:HG13	1:A:916:SER:OG	2.20	0.41
1:A:967:HIS:HA	1:A:971:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:974:ALA:HA	1:A:977:PHE:HD2	1.85	0.41
2:B:198:ASN:HB3	2:B:202:ILE:HG13	2.01	0.41
1:A:1068:LYS:HB3	2:B:428:ASN:HA	2.02	0.41
3:C:173:ILE:HD12	3:C:173:ILE:O	2.20	0.41
3:C:192:GLY:HA2	3:C:223:ALA:H	1.85	0.41
3:C:247:TRP:HE3	3:C:252:PHE:O	2.03	0.41
3:C:15:LEU:O	3:C:27:TRP:HB2	2.20	0.41
1:A:1012:LEU:O	1:A:1013:PHE:C	2.58	0.41
1:A:1179:SER:HA	1:A:1182:PHE:CD2	2.55	0.41
1:A:1190:ILE:H	1:A:1191:PHE:HB2	1.85	0.41
1:A:1459:ALA:O	1:A:1463:TYR:N	2.36	0.41
1:A:1649:ASP:OD2	1:A:1652:THR:HB	2.20	0.41
1:A:2172:LEU:HD21	1:A:2174:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:2415:MET:HE3	1:A:2419:GLU:OE2	2.22	0.41
1:A:870:ASN:HA	1:A:873:LYS:HB2	2.02	0.41
1:A:989:PHE:CD2	1:A:989:PHE:N	2.88	0.41
2:B:110:TYR:HB3	2:B:115:PRO:HD3	2.02	0.41
2:B:1128:VAL:HG21	2:B:1172:LEU:O	2.20	0.41
2:B:156:PRO:CB	2:B:158:PRO:HG3	2.50	0.41
2:B:520:SER:O	2:B:524:ASP:N	2.51	0.41
2:B:747:GLU:CB	2:B:748:SER:HA	2.50	0.41
3:C:192:GLY:HA2	3:C:223:ALA:HB2	2.03	0.41
3:C:62:TYR:CZ	3:C:86:LYS:HA	2.55	0.41
1:A:1585:ARG:HH11	1:A:1589:ALA:N	2.19	0.41
1:A:1650:MET:O	1:A:1653:TRP:N	2.53	0.41
1:A:1773:LEU:O	1:A:1777:SER:OG	2.30	0.41
1:A:1776:TYR:CB	1:A:1793:TRP:HB2	2.48	0.41
1:A:1967:TYR:CB	1:A:1968:HIS:ND1	2.84	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2083:GLU:OE1	1:A:2086:ARG:NE	2.38	0.41
1:A:2300:ALA:O	1:A:2303:LEU:HB2	2.20	0.41
1:A:2412:ASP:O	1:A:2415:MET:N	2.53	0.41
1:A:664:ILE:O	1:A:667:PRO:HD3	2.20	0.41
1:A:668:ASP:N	1:A:669:PRO:HD2	2.35	0.41
1:A:714:THR:N	1:A:717:ARG:NH2	2.62	0.41
1:A:741:LEU:HD23	1:A:741:LEU:HA	1.85	0.41
1:A:794:VAL:O	1:A:798:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:947:TYR:HB2	1:A:950:VAL:CB	2.51	0.41
2:B:208:GLN:HA	2:B:211:LEU:HD12	2.02	0.41
2:B:168:ASN:ND2	2:B:213:ARG:HD3	2.35	0.41
3:C:130:PRO:O	3:C:147:ASP:HA	2.20	0.41
3:C:260:ILE:HG21	3:C:287:THR:HG21	2.03	0.41
1:A:1020:VAL:HG12	1:A:1024:LYS:CE	2.46	0.41
1:A:1114:LEU:HA	1:A:1114:LEU:HD23	1.65	0.41
1:A:1167:PRO:HA	1:A:1170:ARG:HG3	2.02	0.41
1:A:1373:PRO:C	1:A:1375:ARG:H	2.24	0.41
1:A:1401:GLU:O	1:A:1404:PHE:HB3	2.20	0.41
1:A:1402:LEU:HA	1:A:1402:LEU:HD12	1.76	0.41
1:A:1481:MET:HE1	1:A:1497:CYS:N	2.36	0.41
1:A:1603:ILE:HG12	1:A:1604:GLN:NE2	2.35	0.41
1:A:919:GLU:HG3	1:A:1627:GLN:O	2.21	0.41
1:A:1694:PRO:O	1:A:1697:THR:HB	2.20	0.41
1:A:1705:TRP:CZ3	1:A:1757:TRP:HB3	2.56	0.41
1:A:1718:GLN:NE2	1:A:1775:TYR:OH	2.54	0.41
1:A:1924:VAL:HG22	1:A:1956:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:1943:ILE:O	1:A:1987:ARG:NH2	2.52	0.41
1:A:2088:TYR:O	1:A:2092:GLY:N	2.43	0.41
1:A:2320:TYR:O	1:A:2321:THR:C	2.58	0.41
1:A:2380:THR:O	1:A:2383:LEU:N	2.54	0.41
1:A:2534:SER:HB3	1:A:2537:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:776:LEU:CD1	1:A:816:TRP:HB3	2.51	0.41
1:A:782:LYS:O	1:A:786:PRO:HG3	2.20	0.41
1:A:842:TRP:CE3	1:A:842:TRP:HA	2.55	0.41
2:B:782:GLU:HG2	2:B:1248:ASN:CB	2.50	0.41
3:C:61:GLY:HA3	3:C:64:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:1129:LEU:HA	1:A:1129:LEU:HD23	1.77	0.41
1:A:1138:THR:O	1:A:1139:VAL:C	2.59	0.41
1:A:1524:GLY:O	1:A:1526:TRP:NE1	2.53	0.41
1:A:1642:LEU:HA	1:A:1642:LEU:HD23	1.82	0.41
1:A:1808:ASN:HB2	1:A:1873:LEU:HD11	2.03	0.41

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2253:TYR:HB2	1:A:2302:LEU:CD2	2.50	0.41
1:A:714:THR:CB	1:A:715:VAL:HG23	2.49	0.41
1:A:894:LEU:CD2	1:A:898:LYS:HZ1	2.36	0.41
1:A:906:ILE:HG23	1:A:909:SER:OG	2.20	0.41
1:A:969:THR:HA	1:A:970:MET:HA	1.85	0.41
3:C:36:ARG:HD2	3:C:73:ASN:HA	2.03	0.41
1:A:1011:PHE:O	1:A:1015:GLN:HG3	2.20	0.41
1:A:1480:ARG:HH12	1:A:1484:LEU:HD11	1.85	0.41
1:A:1649:ASP:OD2	1:A:1653:TRP:CD1	2.73	0.41
1:A:2075:GLY:O	1:A:2078:LEU:HB2	2.21	0.41
1:A:2115:LEU:HB3	1:A:2168:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:2141:PRO:O	1:A:2143:THR:HG23	2.19	0.41
1:A:2336:LEU:HD11	1:A:2358:PHE:HA	2.03	0.41
1:A:2381:ARG:HA	1:A:2384:THR:HB	2.02	0.41
1:A:2520:ASP:OD1	1:A:2523:THR:N	2.53	0.41
1:A:728:PRO:HA	1:A:731:ARG:HB2	2.03	0.41
1:A:891:LEU:HA	1:A:891:LEU:HD23	1.73	0.41
2:B:1046:ILE:HD12	2:B:1096:TRP:HZ2	1.85	0.41
2:B:1233:ASN:HB3	2:B:1238:ILE:H	1.85	0.41
2:B:148:PHE:O	2:B:192:PHE:N	2.53	0.41
3:C:136:LEU:HA	3:C:142:GLU:O	2.21	0.41
3:C:227:ARG:C	3:C:235:LEU:HD12	2.41	0.41
1:A:1060:VAL:HG22	1:A:1063:LEU:HD12	2.03	0.41
1:A:1185:GLY:O	1:A:1220:TYR:OH	2.39	0.41
1:A:1216:ILE:O	1:A:1220:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:1550:LEU:O	1:A:1553:HIS:N	2.54	0.41
1:A:1623:LEU:O	1:A:1625:GLY:N	2.54	0.41
1:A:1788:LYS:HE3	1:A:1788:LYS:HB2	1.87	0.41
1:A:1916:TRP:CD1	1:A:1916:TRP:N	2.88	0.41
1:A:1943:ILE:HG12	1:A:1976:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:2000:GLU:CG	1:A:2001:HIS:ND1	2.84	0.41
1:A:2048:PHE:HE1	1:A:2085:CYS:CB	2.33	0.41
1:A:769:ARG:N	1:A:770:PRO:HD2	2.36	0.41
1:A:783:LEU:O	1:A:786:PRO:HG2	2.21	0.41
1:A:951:SER:HG	1:A:952:MET:H	1.69	0.41
3:C:208:THR:O	3:C:208:THR:HG23	2.21	0.41
3:C:25:ARG:HD2	3:C:311:HIS:CE1	2.56	0.41
1:A:1451:GLU:HG3	1:A:1456:TRP:HZ3	1.85	0.41
1:A:1465:LYS:O	1:A:1468:ASP:HB2	2.21	0.41
1:A:1490:TRP:O	1:A:1491:GLY:C	2.59	0.41
1:A:920:SER:C	1:A:1583:TYR:HH	2.23	0.41

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1637:LEU:O	1:A:1641:SER:OG	2.30	0.41
1:A:1639:VAL:O	1:A:1642:LEU:N	2.50	0.41
1:A:1732:ILE:HD11	1:A:1740:LYS:HD3	2.02	0.41
1:A:1885:VAL:O	1:A:1888:PHE:HB2	2.21	0.41
1:A:1993:LYS:HE3	1:A:1994:ILE:HG13	2.03	0.41
1:A:2097:LEU:HG	1:A:2101:TRP:NE1	2.36	0.41
1:A:2015:GLU:HB2	1:A:2130:LEU:CG	2.51	0.41
1:A:2262:ASN:N	1:A:2266:ARG:HH12	2.19	0.41
1:A:2300:ALA:HA	1:A:2303:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:2340:HIS:H	1:A:2343:ASN:CG	2.24	0.41
1:A:705:PHE:CD1	1:A:732:LYS:NZ	2.83	0.41
1:A:987:VAL:HG12	1:A:988:GLN:OE1	2.21	0.41
3:C:156:ASP:OD1	3:C:157:LEU:N	2.54	0.41
1:A:1027:ILE:H	1:A:1031:MET:HE2	1.86	0.41
1:A:1031:MET:C	1:A:1033:GLU:N	2.73	0.41
1:A:1139:VAL:CG2	1:A:1176:THR:HA	2.44	0.41
1:A:1389:LYS:C	1:A:1392:ALA:HB3	2.41	0.41
1:A:1562:GLN:C	1:A:1566:LYS:NZ	2.74	0.41
1:A:1673:LEU:HA	1:A:1676:LEU:HD12	2.03	0.41
1:A:1800:ALA:O	1:A:1804:TYR:CD2	2.74	0.41
1:A:2196:GLU:OE1	1:A:2229:PRO:HG2	2.21	0.41
1:A:2206:ASN:O	1:A:2210:ALA:N	2.44	0.41
1:A:628:ARG:O	1:A:631:THR:OG1	2.32	0.41
1:A:663:GLY:C	1:A:665:THR:H	2.24	0.41
1:A:797:ASN:OD1	1:A:797:ASN:N	2.53	0.41
1:A:894:LEU:HD22	1:A:898:LYS:NZ	2.34	0.41
1:A:961:ASP:O	1:A:964:LEU:HB2	2.21	0.41
2:B:167:PHE:N	2:B:167:PHE:CD1	2.88	0.41
2:B:897:VAL:HG13	2:B:898:SER:H	1.86	0.41
3:C:156:ASP:HB3	3:C:160:ASP:N	2.36	0.41
1:A:971:VAL:HB	1:A:1011:PHE:CZ	2.56	0.41
1:A:1410:PRO:HA	1:A:1413:LEU:HD12	2.02	0.41
1:A:1482:ARG:N	1:A:1515:MET:HE1	2.36	0.41
1:A:1560:ALA:HA	1:A:1563:CYS:SG	2.61	0.41
1:A:1590:MET:HA	1:A:1593:CYS:SG	2.61	0.41
1:A:1766:GLU:HA	1:A:1769:ILE:HD12	2.03	0.41
1:A:2024:HIS:NE2	1:A:2025:GLU:HG3	2.36	0.41
1:A:2098:THR:HA	1:A:2101:TRP:CD1	2.55	0.41
1:A:2299:LEU:O	1:A:2303:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:2399:THR:O	1:A:2402:THR:N	2.54	0.41
1:A:611:LEU:HD23	1:A:614:GLU: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:620:MET:HA	1:A:623:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:837:ARG:O	1:A:838:GLN:C	2.59	0.41
1:A:865:LEU:H	1:A:910:ARG:HH21	1.66	0.41
2:B:209:PHE:O	2:B:212:GLN:HB2	2.21	0.41
3:C:145:VAL:O	3:C:153:HIS:N	2.54	0.41
3:C:185:MET:HE2	3:C:210:LEU:HD22	2.02	0.41
3:C:229:SER:HA	3:C:278:PHE:CG	2.56	0.41
3:C:305:LYS:HA	3:C:305:LYS:HD3	1.83	0.41
3:C:40:HIS:CE1	3:C:61:GLY:HA2	2.55	0.41
1:A:1096:LEU:HD13	1:A:1133:LYS:CD	2.49	0.41
1:A:1212:LEU:HA	1:A:1215:ARG:HB2	2.03	0.41
1:A:1602:VAL:C	1:A:1604:GLN:N	2.73	0.41
1:A:1717:MET:HG2	1:A:1754:LEU:CG	2.51	0.41
1:A:1808:ASN:C	1:A:1811:ARG:H	2.24	0.41
1:A:1882:VAL:HG13	1:A:1922:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:1936:LEU:HD23	1:A:1936:LEU:HA	1.82	0.41
1:A:1941:GLN:CD	1:A:1941:GLN:H	2.22	0.41
1:A:1974:TYR:N	1:A:1975:PRO:HD2	2.36	0.41
1:A:2131:LEU:O	1:A:2134:ARG:NH2	2.54	0.41
1:A:2340:HIS:HB2	1:A:2341:PRO:CD	2.51	0.41
1:A:2347:ASP:OD2	1:A:2349:LEU:N	2.54	0.41
1:A:2543:ILE:O	1:A:2546:CYS:N	2.52	0.41
1:A:672:ARG:O	1:A:675:VAL:N	2.54	0.41
1:A:750:LYS:HE2	1:A:790:PRO:HA	2.03	0.41
1:A:822:ILE:O	1:A:823:ILE:C	2.60	0.41
2:B:1180:LEU:HB3	2:B:1192:VAL:HG13	2.03	0.41
3:C:137:HIS:ND1	3:C:138:PRO:HD2	2.36	0.41
3:C:175:SER:O	3:C:188:VAL:HG12	2.20	0.41
3:C:219:HIS:HD2	3:C:223:ALA:CB	2.34	0.41
3:C:285:ILE:HB	3:C:299:VAL:CG2	2.49	0.41
1:A:1092:VAL:O	1:A:1092:VAL:HG12	2.21	0.40
1:A:1153:SER:O	1:A:1156:ILE:N	2.54	0.40
1:A:1585:ARG:O	1:A:1588:GLY:N	2.54	0.40
1:A:1724:MET:O	1:A:1727:GLN:N	2.54	0.40
1:A:1907:LEU:HD21	1:A:1935:TRP:CZ3	2.56	0.40
1:A:2119:THR:OG1	1:A:2120:SER:N	2.53	0.40
1:A:2253:TYR:CZ	1:A:2298:ASP:HA	2.56	0.40
1:A:2339:ARG:CZ	1:A:2356:ILE:O	2.69	0.40
1:A:2374:LYS:HA	1:A:2374:LYS:HD3	1.83	0.40
1:A:1435:TYR:CD2	1:A:2390:THR:HG21	2.56	0.40
1:A:746:ILE:O	1:A:750:LYS:N	2.39	0.40

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:862:PRO:CD	1:A:863:THR:H	2.34	0.40
3:C:106:ASP:CG	3:C:108:THR:H	2.25	0.40
3:C:137:HIS:HB2	3:C:142:GLU:HB2	2.03	0.40
3:C:218:ALA:O	3:C:245:LYS:HD2	2.21	0.40
3:C:292:ASN:HB3	3:C:311:HIS:HB2	2.03	0.40
1:A:1023:VAL:HA	1:A:1031:MET:HE1	2.04	0.40
1:A:1074:LEU:HD22	1:A:1078:MET:SD	2.61	0.40
1:A:1075:ILE:HG12	1:A:1110:TYR:CE1	2.56	0.40
1:A:1100:ILE:N	1:A:1137:GLU:OE2	2.55	0.40
1:A:1501:TRP:O	1:A:1504:VAL:HG22	2.22	0.40
1:A:1623:LEU:HB2	1:A:1640:ARG:HH12	1.86	0.40
1:A:1777:SER:O	1:A:1780:THR:HB	2.21	0.40
1:A:1960:LEU:O	1:A:1963:ASP:HB2	2.22	0.40
1:A:2424:ASP:OD2	1:A:2427:LEU:HD12	2.21	0.40
1:A:613:SER:HA	1:A:616:LYS:HD2	2.03	0.40
1:A:614:GLU:O	1:A:618:ILE:HG13	2.21	0.40
1:A:746:ILE:O	1:A:747:GLY:C	2.59	0.40
1:A:754:ALA:C	1:A:758:GLY:H	2.23	0.40
1:A:761:VAL:O	1:A:762:SER:C	2.60	0.40
2:B:212:GLN:HA	2:B:216:GLU:CD	2.42	0.40
3:C:131:ILE:HG23	3:C:145:VAL:CG1	2.49	0.40
3:C:137:HIS:HD1	3:C:139:ASN:H	1.70	0.40
3:C:198:ASN:HD21	3:C:213:LYS:HB2	1.86	0.40
3:C:197:TRP:CZ3	3:C:212:PRO:HD3	2.56	0.40
1:A:1473:ASP:O	1:A:1474:PRO:C	2.59	0.40
1:A:1480:ARG:O	1:A:1483:CYS:HB2	2.21	0.40
1:A:1540:THR:C	1:A:1570:LEU:HD13	2.42	0.40
1:A:1627:GLN:C	1:A:1628:ARG:HG2	2.42	0.40
1:A:1888:PHE:CE1	1:A:1905:ARG:HG3	2.56	0.40
1:A:2011:MET:HA	1:A:2014:GLU:OE1	2.22	0.40
1:A:2021:ILE:O	1:A:2022:LEU:HD23	2.22	0.40
1:A:2083:GLU:O	1:A:2087:LYS:HG3	2.22	0.40
1:A:2094:VAL:HA	1:A:2097:LEU:HB3	2.04	0.40
1:A:2265:HIS:HA	1:A:2268:MET:CG	2.51	0.40
1:A:2284:VAL:O	1:A:2288:GLU:HG3	2.22	0.40
1:A:2422:VAL:CG1	1:A:2497:ALA:HB1	2.51	0.40
1:A:2513:PHE:CE1	1:A:2527:LEU:HB3	2.56	0.40
1:A:784:LYS:O	1:A:787:ASP:N	2.44	0.40
1:A:919:GLU:C	1:A:1583:TYR:CZ	2.95	0.40
1:A:937:ASN:HA	1:A:940:ASN:HB2	2.04	0.40
2:B:673:GLN:O	2:B:676:SER:N	2.50	0.40

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1790:TRP:HB3	1:A:1891:SER:CA	2.52	0.40
1:A:2016:LEU:O	1:A:2020:ALA:N	2.50	0.40
1:A:2081:ALA:HA	1:A:2084:TRP:HB2	2.04	0.40
1:A:2114:GLN:HA	1:A:2117:GLN:NE2	2.36	0.40
1:A:2257:LYS:N	1:A:2257:LYS:HD2	2.37	0.40
1:A:2274:ASP:HB2	1:A:2278:LEU:HD21	2.02	0.40
1:A:578:ASP:CA	1:A:582:ILE:H	2.34	0.40
1:A:632:PRO:O	1:A:635:HIS:HB2	2.22	0.40
1:A:757:LEU:O	1:A:758:GLY:C	2.59	0.40
1:A:841:LEU:HA	1:A:844:LEU:CD1	2.51	0.40
1:A:845:GLY:HA2	1:A:848:VAL:HB	2.04	0.40
2:B:1094:ARG:HG2	2:B:1118:MET:CB	2.51	0.40
2:B:140:ASN:HB2	2:B:187:GLY:HA3	2.04	0.40
1:A:1114:LEU:C	1:A:1116:PRO:HD2	2.42	0.40
1:A:1182:PHE:CE1	1:A:1212:LEU:HD21	2.56	0.40
1:A:920:SER:C	1:A:1583:TYR:OH	2.60	0.40
1:A:921:LYS:HG3	1:A:1627:GLN:NE2	2.37	0.40
1:A:1793:TRP:HA	1:A:1796:MET:HB3	2.04	0.40
1:A:2223:GLN:H	1:A:2223:GLN:CD	2.25	0.40
1:A:568:PRO:HA	1:A:569:GLY:C	2.42	0.40
1:A:734:LEU:HA	1:A:735:ILE:HA	1.77	0.40
1:A:781:LEU:HA	1:A:784:LYS:HG3	2.04	0.40
1:A:837:ARG:C	1:A:839:VAL:N	2.74	0.40
1:A:920:SER:OG	1:A:1627:GLN:OE1	2.39	0.40
3:C:277:ALA:H	3:C:286:VAL:H	1.69	0.40

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles ⓘ

### 5.3.1 Protein backbone ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	2089/2549 (82%)	1654 (79%)	386 (18%)	49 (2%)	8 50

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	a	2089/2549 (82%)	1656 (79%)	384 (18%)	49 (2%)	8	50
2	B	767/1335 (58%)	608 (79%)	132 (17%)	27 (4%)	4	41
2	b	767/1335 (58%)	609 (79%)	131 (17%)	27 (4%)	4	41
3	C	315/326 (97%)	281 (89%)	33 (10%)	1 (0%)	46	83
3	c	315/326 (97%)	281 (89%)	33 (10%)	1 (0%)	46	83
All	All	6342/8420 (75%)	5089 (80%)	1099 (17%)	154 (2%)	12	49

All (154) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	225	PRO
1	A	351	PRO
1	A	404	PRO
1	A	568	PRO
1	A	664	ILE
1	A	837	ARG
1	A	1091	ILE
1	A	1092	VAL
2	B	96	GLN
2	B	115	PRO
2	B	143	GLU
2	B	425	GLU
2	B	488	ARG
2	B	489	PRO
2	B	807	VAL
1	a	225	PRO
1	a	351	PRO
1	a	404	PRO
1	a	568	PRO
1	a	664	ILE
1	a	837	ARG
1	a	1091	ILE
1	a	1092	VAL
2	b	96	GLN
2	b	115	PRO
2	b	143	GLU
2	b	425	GLU
2	b	488	ARG
2	b	489	PRO
2	b	807	VAL

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	717	ARG
1	A	778	ALA
1	A	838	GLN
1	A	919	GLU
1	A	987	VAL
1	A	1067	PHE
1	A	1068	LYS
2	B	91	LEU
2	B	95	PRO
2	B	142	LYS
2	B	154	GLY
2	B	444	VAL
2	B	496	ALA
1	a	717	ARG
1	a	778	ALA
1	a	838	GLN
1	a	919	GLU
1	a	987	VAL
1	a	1067	PHE
1	a	1068	LYS
2	b	91	LEU
2	b	95	PRO
2	b	142	LYS
2	b	154	GLY
2	b	444	VAL
2	b	496	ALA
1	A	775	ILE
1	A	883	GLU
2	B	494	ILE
1	a	775	ILE
1	a	883	GLU
2	b	494	ILE
1	A	256	ASN
1	A	643	VAL
1	A	743	HIS
1	A	804	GLU
1	A	893	ALA
1	A	972	VAL
1	A	1079	LEU
1	A	1656	TYR
2	B	158	PRO
2	B	168	ASN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	B	402	ALA
2	B	472	ILE
2	B	510	VAL
1	a	256	ASN
1	a	643	VAL
1	a	743	HIS
1	a	804	GLU
1	a	893	ALA
1	a	972	VAL
1	a	1079	LEU
1	a	1656	TYR
2	b	158	PRO
2	b	168	ASN
2	b	402	ALA
2	b	472	ILE
2	b	510	VAL
2	b	1075	TYR
1	A	857	PRO
1	A	865	LEU
1	A	867	VAL
1	A	1507	GLU
1	A	2078	LEU
1	A	2288	GLU
1	A	2326	VAL
1	A	2396	TYR
1	A	2420	ALA
2	B	493	PHE
2	B	497	LYS
2	B	630	SER
2	B	1075	TYR
2	B	1176	SER
1	a	857	PRO
1	a	865	LEU
1	a	867	VAL
1	a	1507	GLU
1	a	2078	LEU
1	a	2288	GLU
1	a	2326	VAL
1	a	2396	TYR
1	a	2420	ALA
2	b	493	PHE
2	b	497	LYS

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	b	630	SER
2	b	1176	SER
1	A	834	LEU
1	A	1699	ALA
1	A	1875	LYS
1	A	2264	GLU
1	A	2405	GLU
2	B	541	VAL
1	a	834	LEU
1	a	1699	ALA
1	a	1875	LYS
1	a	2264	GLU
1	a	2405	GLU
2	b	541	VAL
1	A	348	SER
1	A	712	ILE
1	a	348	SER
1	a	712	ILE
1	A	331	VAL
1	A	1027	ILE
1	a	331	VAL
1	a	1027	ILE
1	A	761	VAL
1	A	1008	ILE
1	A	1636	ILE
2	B	130	VAL
2	B	164	VAL
1	a	761	VAL
1	a	1008	ILE
1	a	1636	ILE
2	b	130	VAL
2	b	164	VAL
1	A	644	VAL
1	A	2250	ILE
1	A	2504	VAL
3	C	265	PRO
1	a	644	VAL
1	a	2250	ILE
1	a	2504	VAL
3	c	265	PRO

### 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	1487/2220 (67%)	1485 (100%)	2 (0%)	95	97
1	a	1487/2220 (67%)	1485 (100%)	2 (0%)	95	97
2	B	185/1163 (16%)	167 (90%)	18 (10%)	10	43
2	b	177/1163 (15%)	160 (90%)	17 (10%)	10	43
3	C	269/276 (98%)	269 (100%)	0	100	100
3	c	269/276 (98%)	269 (100%)	0	100	100
All	All	3874/7318 (53%)	3835 (99%)	39 (1%)	83	91

All (39) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	660	LEU
1	A	1632	ASP
2	B	90	PRO
2	B	92	SER
2	B	95	PRO
2	B	127	VAL
2	B	159	THR
2	B	421	THR
2	B	897	VAL
2	B	902	PRO
2	B	918	PRO
2	B	924	PRO
2	B	1036	PRO
2	B	1040	VAL
2	B	1065	PRO
2	B	1068	THR
2	B	1088	THR
2	B	1162	PRO
2	B	1214	VAL
2	B	1244	PRO
1	a	660	LEU
1	a	1632	ASP

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
2	b	90	PRO
2	b	92	SER
2	b	95	PRO
2	b	127	VAL
2	b	159	THR
2	b	421	THR
2	b	897	VAL
2	b	902	PRO
2	b	918	PRO
2	b	924	PRO
2	b	1036	PRO
2	b	1065	PRO
2	b	1068	THR
2	b	1088	THR
2	b	1162	PRO
2	b	1214	VAL
2	b	1244	PRO

Some sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (100) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	597	HIS
1	A	601	GLN
1	A	609	HIS
1	A	612	ASN
1	A	686	HIS
1	A	694	GLN
1	A	701	ASN
1	A	722	ASN
1	A	743	HIS
1	A	829	GLN
1	A	966	HIS
1	A	1084	HIS
1	A	1112	HIS
1	A	1196	ASN
1	A	1202	HIS
1	A	1206	HIS
1	A	1405	GLN
1	A	1420	ASN
1	A	1424	GLN
1	A	1439	HIS
1	A	1604	GLN

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1716	HIS
1	A	1718	GLN
1	A	1729	GLN
1	A	1970	GLN
1	A	1988	HIS
1	A	1989	ASN
1	A	1992	ASN
1	A	1997	ASN
1	A	2055	HIS
1	A	2071	ASN
1	A	2106	HIS
1	A	2147	ASN
1	A	2180	HIS
1	A	2219	ASN
1	A	2265	HIS
1	A	2395	ASN
1	A	2410	HIS
1	A	2428	ASN
1	A	2494	ASN
1	A	2535	HIS
2	B	1105	ASN
2	B	1177	HIS
3	C	132	ASN
3	C	140	GLN
3	C	153	HIS
3	C	164	GLN
3	C	219	HIS
3	C	242	GLN
3	C	251	ASN
1	a	597	HIS
1	a	601	GLN
1	a	609	HIS
1	a	612	ASN
1	a	686	HIS
1	a	694	GLN
1	a	701	ASN
1	a	722	ASN
1	a	743	HIS
1	a	829	GLN
1	a	966	HIS
1	a	1084	HIS
1	a	1112	HIS

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Mol	Chain	Res	Type
1	a	1196	ASN
1	a	1202	HIS
1	a	1206	HIS
1	a	1405	GLN
1	a	1420	ASN
1	a	1424	GLN
1	a	1439	HIS
1	a	1541	HIS
1	a	1604	GLN
1	a	1716	HIS
1	a	1718	GLN
1	a	1729	GLN
1	a	1970	GLN
1	a	1988	HIS
1	a	1989	ASN
1	a	1992	ASN
1	a	1997	ASN
1	a	2055	HIS
1	a	2106	HIS
1	a	2147	ASN
1	a	2180	HIS
1	a	2219	ASN
1	a	2265	HIS
1	a	2395	ASN
1	a	2410	HIS
1	a	2428	ASN
1	a	2494	ASN
1	a	2535	HIS
2	b	1105	ASN
2	b	1177	HIS
3	c	132	ASN
3	c	140	GLN
3	c	153	HIS
3	c	164	GLN
3	c	219	HIS
3	c	242	GLN
3	c	251	ASN

### 5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

## 5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no carbohydrates in this entry.

## 5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

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

There are no chain breaks in this entry.