



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 24, 2026 – 05:21 AM UTC

PDB ID : 9EAG / pdb_00009eag
EMDB ID : EMD-47801
Title : The Structure of ApoB100 from Human Low-Density Lipoprotein
Authors : Berndsen, Z.T.; Cassidy, C.K.
Deposited on : 2024-11-11
Resolution : 9.00 Å(reported)
Based on initial model : .

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

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

A user guide is available at

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

The types of validation reports are described at

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

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

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

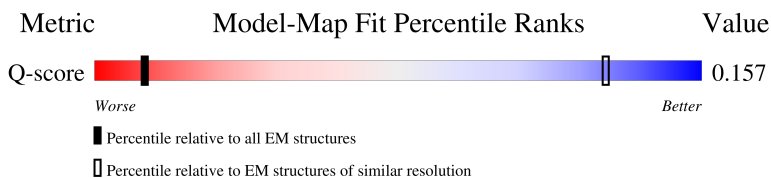
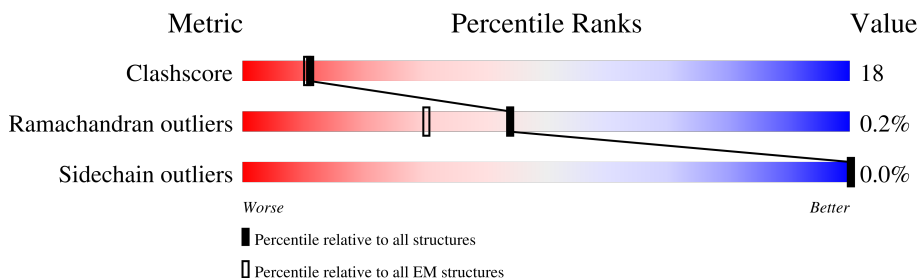
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 9.00 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
Sidechain outliers	223484	23102	-
Q-score	-	25397	257 (8.50 - 9.50)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	4563	37% 61% 38% .

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 36083 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

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

- Molecule 1 is a protein called Apolipoprotein B 100.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	4526	Total	C	N	O	S	0	0
			36083	23018	6066	6897	102		

G1502	L1503	Q1506	R1507	D1508	P1509	R1513	L1514	N1515	L1520	R1521	F1522	N1523	S1524	L1527	Q1528	G1529	T1530	N1531	Q1532	I1533	T1534	G1535	R1536	Y1537	E1538	S1543	L1544	T1545	S1546	D1549	L1550	I1554	I1555	K1556	A1559	S1560	L1561	N1565	L1570	K1571	S1572	D1573	T1574	N1575	G1576	K1577	Y1578	A1582										
G1424	S1425	L1426	R1427	H1428	K1429	F1430	L1431	D1432	L1433	N1434	I1435	L1436	F1437	S1438	H1439	V1440	L1443	G1444	N1445	N1446	P1447	V1448	S1449	L1453	D1456	A1457	S1458	L1459	P1463	V1469	S1473	K1474	K1475	K1476	Q1477	H1478	L1479	F1480	V1481	V1484	Q1489	F1490	D1491	V1492	S1493	Y1496	G1499	T1499	L1500	Y1501								
L1345	Y1346	Q1347	L1348	Q1349	V1350	P1351	L1352	L1353	G1354	V1355	L1356	D1357	Y1367	N1368	V1369	S1370	Y1373	S1374	G1375	G1376	D1381	L1385	Y1389	H1390	M1391	K1392	A1393	D1394	S1395	V1396	V1397	D1398	L1399	L1400	S1401	Y1402	M1403	V1404	Q1405	E1409	T1410	T1411	Y1412	D1413	H1414	K1415	N1416	T1417	F1418	L1419	L1420	S1421						
V1285	K1286	Y1287	T1288	L1289	N1290	K1291	N1292	S1293	L1294	K1295	I1296	E1297	I1298	P1299	L1300	P1301	F1302	G1303	G1304	K1305	S1306	S1307	R1308	D1309	L1310	K1311	M1312	L1313	E1314	V1315	R1317	T1318	P1319	A1320	L1321	H1322	F1323	K1324	S1325	V1326	G1327	F1328	H1329	L1330	P1331	S1332	R1333	E1334	F1335	Q1336	V1337	P1338	T1339	F1340	T1341	I1342	P1343	K1344
F1223	R1224	H1225	V1226	G1227	L1230	I1231	V1232	A1233	M1234	S1235	S1236	W1237	L1238	Q1239	K1240	A1241	S1242	G1243	S1244	L1245	P1246	Y1247	T1248	Q1249	T1250	L1251	Q1252	D1253	H1254	L1255	M1256	S1257	E1260	F1261	N1262	L1263	Q1264	M1265	M1266	G1267	L1268	P1269	D1270	F1271	H1272	I1273	P1274	E1275	M1276	L1277	K1280	S1281	D1282	G1283	R1284			
L1147	D1151	S1152	S1153	A1154	T1155	G1158	S1159	T1160	V1161	S1162	K1163	R1164	W1167	H1168	Y1169	D1170	E1171	E1172	K1173	I1174	E1175	F1176	E1177	W1178	N1179	D1185	T1186	K1187	K1188	N1189	L1197	S1198	D1199	Y1200	P1201	K1202	S1203	L1204	H1205	M1206	Y1207	R1210	L1211	L1212	D1213	R1214	R1215	V1216	P1217	Q1218	T1219	D1220						
R1078	V1079	E1082	S1083	T1084	E1085	G1086	T1087	T1088	L1092	T1093	L1094	D1095	T1096	K1099	K1100	I1101	T1102	E1103	V1104	A1105	L1106	M1107	S1111	C1112	D1113	T1114	K1115	E1116	E1117	R1118	K1119	I1120	K1121	G1122	V1123	I1124	S1125	I1126	P1127	R1128	L1129	Q1130	A1131	E1132	A1133	R1134	S1135	E1136	I1137	H1140	W1141	A1144						
S985	S986	T987	D988	S989	A990	S991	Y992	Y993	P994	T996	G997	D998	T999	R1000	E1002	L1003	E1004	L1005	R1006	P1007	E1010	Q1013	Y1014	S1015	Y1020	E1021	K1022	Q1023	R1024	E1025	A1028	L1029	L1033	T1037	G1041	A1042	K1043	Q1044	M1049	S1061	S1062	E1063	V1064	Q1065	I1066	V1071												
Y829	F831	M832	E833	L838	P839	T840	G841	L844	Q845	L846	Q847	V853	L854	A855	P856	G857	A858	K859	A860	G861	V862	K863	L864	E865	V866	A867	N868	M869	Q870	V874	A875	K876	V879	S880	V881	E882	F883	T885	N886	M887	G888	I889	I890	I891	P892	D893	F894	A895	R896	V899	Q900							
M901	N902	T903	N904	F905	F906	H907	E908	S909	G910	L911	E912	A913	H914	V915	A916	L917	K923	F924	I925	I926	P927	S928	P929	K930	P932	V933	K934	L936	S937	N938	G939	N940	T941	L942	H943	L944	V945	S946	T950	E951	V952	I953	N959	R960	Q968	V969	F970	P971	D975	Y975	N983	A984						
I754	M755	L756	S757	V758	E759	K760	L761	K763	D764	L765	K766	S767	K768	E769	E772	A773	R774	A775	Y776	L777	R778	E783	L784	G785	F786	D791	L795	G796	K797	L798	M801	R804	Q807	P810	I813	G814	E815	V816	I817	R818	K819	G820	S821	K822	F825	A885	D886	L887	I888	E889	I690	G891	L692	E893				
G694	K695	G696	F697	E698	P699	T700	L701	E702	L704	F705	G706	K707	Q708	G709	F710	F711	D712	S713	V714	V715	N716	K717	A718	L719	G720	W721	V722	N723	G724	Q725	K726	P727	D728	G729	V730	S731	K732	V733	L734	V735	D736	H737	F738	G739	Y740	T741	K742	D743	D744	K745	H746	E747	Q748	D749	M750	V751	N752	G753
K632	F633	S634	R635	M636	Y637	Q638	L639	Y640	K641	S642	V643	S644	L645	P646	S647	L648	D649	P650	A651	S652	A653	K654	I655	E656	G657	N658	L659	I660	P663	N664	N665	Y666	L667	P668	K669	E670	S671	M672	L673	K674	T675	L676	L677	F680	G681	F682	S684	A685	D686	L687	I688	E689	I690	G691	L692	E693		

T2447	Q2448	R2449	L2450	I2454	Q2455	A2456	L2457	E2458	P2460	L2461	K2462	A2463	E2464	A2465	L2466	K2467	L2468	F2469	L2470	E2471	E2472	T2473	K2474	A2475	T2476	V2477	A2478	V2479	Y2480	L2481	E2482	S2483	L2484	Q2485	D2486	T2487	F2488	L2489	T2490	L2491	L2492	L2493	N2494	W2495	L2496	Q2497	E2498	A2499	Q2434	T2439	I2443	R2444								
L2370	K2371	E2372	T2373	L2374	Q2375	K2376	L2377	S2378	N2379	V2380	L2381	Q2382	K2385	L2386	K2387	D2388	Y2389	F2390	E2391	K2392	L2393	V2394	Q2395	D2398	D2399	A2400	K2403	L2404	N2405	E2406	L2407	S2408	E2414	N2417	K2418	F2419	L2420	L2424	K2425	K2426	L2427	K2428	S2429	F2430	D2431	Y2432	H2433	Q2434	T2439	I2443	R2444									
I2310	N2311	D2312	L2313	L2314	E2315	H2316	V2317	K2318	N2319	F2320	V2321	L2322	N2323	L2324	L2325	D2326	F2328	E2329	V2330	E2332	K2333	L2334	N2335	A2336	F2337	R2338	A2339	K2340	V2341	H2342	L2343	L2344	L2345	L2346	R2347	Y2348	E2349	V2350	D2351	Q2352	Q2353	L2354	Q2355	V2356	L2357	N2358	D2359	K2360	L2361	V2362	E2363	L2364	A2365	H2366	Q2367	Y2368	K2369			
Q2250	N2251	V2252	D2253	T2254	K2255	Y2256	Q2257	L2258	R2259	L2260	Q2261	L2262	Q2263	E2264	K2265	L2266	Q2267	Q2268	K2269	R2270	R2271	H2272	L2273	Q2274	N2275	L2276	D2277	L2278	Q2279	H2280	L2281	A2282	G2283	K2284	L2285	K2286	Q2287	H2288	L2289	E2290	A2291	D2292	D2293	V2294	R2295	V2296	L2297	L2298	D2299	Q2300	L2301	G2302	T2303	L2304	I2305	S2306	F2307	E2308	R2309	
L2126	N2127	S2128	F2129	N2130	W2131	E2132	R2133	Q2134	D2065	V2066	H2067	S2068	L2069	N2070	L2071	P2072	F2073	F2074	E2075	L2076	L2077	F2081	N2084	Q2085	Q2086	E2093	Q2096	R2097	N2098	L2099	K2100	H2101	I2102	N2103	I2104	A2163	K2164	L2165	L2166	F2167	N2168	E2169	K2170	R2171	L2172	S2172	Q2173	L2174	Q2175	T2176	Y2177	N2178	L2179	Q2180	F2181	D2182	Q2183	Y2184	L2185	K2186
D2190	L2191	D2192	H2193	L2194	A2197	L2198	A2199	N2200	L2201	L2202	D2203	E2204	L2205	L2206	E2207	K2208	L2209	K2210	S2211	L2212	D2213	E2214	H2215	Y2216	H2217	L2218	R2219	V2220	N2221	L2222	V2223	K2224	T2225	L2226	H2227	D2228	L2229	H2230	L2231	F2232	L2233	E2234	N2235	L2236	D2237	F2238	N2239	K2240	G2241	S2242	S2243	S2244	T2245	A2246	W2248	L2249				
Q2250	N2251	V2252	D2253	T2254	K2255	Y2256	Q2257	L2258	R2259	L2260	Q2261	L2262	Q2263	E2264	K2265	L2266	Q2267	Q2268	K2269	R2270	R2271	H2272	L2273	Q2274	N2275	L2276	D2277	L2278	Q2279	H2280	L2281	A2282	G2283	K2284	L2285	K2286	Q2287	H2288	L2289	E2290	A2291	D2292	D2293	V2294	R2295	V2296	L2297	L2298	D2299	Q2300	L2301	G2302	T2303	L2304	I2305	S2306	F2307	E2308	R2309	
I2310	N2311	D2312	L2313	L2314	E2315	H2316	V2317	K2318	N2319	F2320	V2321	L2322	N2323	L2324	L2325	D2326	F2328	E2329	V2330	E2332	K2333	L2334	N2335	A2336	F2337	R2338	A2339	K2340	V2341	H2342	L2343	L2344	L2345	L2346	R2347	Y2348	E2349	V2350	D2351	Q2352	Q2353	L2354	Q2355	V2356	L2357	N2358	D2359	K2360	L2361	V2362	E2363	L2364	A2365	H2366	Q2367	Y2368	K2369			
L2370	K2371	E2372	T2373	L2374	Q2375	K2376	L2377	S2378	N2379	V2380	L2381	Q2382	K2385	L2386	K2387	D2388	Y2389	F2390	E2391	K2392	L2393	V2394	Q2395	D2398	D2399	A2400	K2403	L2404	N2405	E2406	L2407	S2408	E2414	N2417	K2418	F2419	L2420	L2424	K2425	K2426	L2427	K2428	S2429	F2430	D2431	Y2432	H2433	Q2434	T2439	I2443	R2444									
T2447	T2448	T2449	T2450	T2454	Q2455	A2456	L2457	E2458	P2460	L2461	K2462	A2463	E2464	A2465	L2466	K2467	L2468	F2469	L2470	E2471	E2472	T2473	K2474	A2475	T2476	V2477	A2478	V2479	Y2480	L2481	E2482	S2483	L2484	Q2485	D2486	T2487	F2488	L2489	T2490	L2491	L2492	L2493	N2494	W2495	L2496	Q2497	E2498	A2499	Q2434	T2439	I2443	R2444								



E4223	E4159	K4087	D4017	A3942	Q3860	T3798	I3732	S3664	S3597	S3528	Q3442	Q3359	E4223
V4224	G4160	Y4088	S4020	S3943	T3861	K3799	P3733	L3665	A3598	S3529	E3443	S3360	V4224
G4225	Q4161	H4089	K4021	K3946	I3862	Y3800	G3734	H3668	L3599	V3600	I3361	I3362	G4225
T4226	A4162	E4090	W4022	G3947	I3863	S3801	L3735	L3669	V3600	L3532	K3449	K3363	T4226
V4227	S4163	H4092	W4022	F3948	I3864	Q3802	L3737	R3670	Q3533	Q3534	S3450	A3364	V4227
L4228	G4166	L4095	Y4026	F3949	P3865	P3803	N3738	F3671	H3603	G3534	K3451	H3365	L4228
V4231	L4167	L4098	F4024	A3950	S3866	E3804	N3739	L3672	P3607	T3535	V3454	S3368	V4231
Y4232	L4168	L4098	Y4025	R3951	I3867	D3805	R3739	K3673	S3608	T3536	S3456	S3371	Y4232
S4233	D4169	S4101	Y4027	R3952	K3868	D3806	L3740	N3674	S3609	D3539	S3457	S3372	S4233
K4234	V4170	S4102	Y4028	D3953	F3869	N3741	L3741	I3675	I3541	D3540	M3458	V3373	K4234
V4235	V4171	K4103	S4029	S3955	S3870	P3809	V3743	S3683	W3542	K3540	F3460	I3374	V4235
H4236	V4172	L4104	Q4029	S3956	V3871	P3810	L3744	S3684	K3543	F3461	K3460	I3375	H4236
D4173	D4173	R4105	Q4030	E3957	V3872	F3811	V3745	S3685	L3544	Y3462	D3463	A3376	D4173
L4175	L4175	R4106	S4031	Y3958	A3873	F3811	V3746	W3686	L3544	F3464	F3464	L3377	L4175
V4178	V4178	Q4109	P4032	Y3964	G3874	V3815	T3747	D3686	K3547	A3473	A3473	K3380	V4178
T4179	T4179	E3965	D4033	E3965	I3875	P3816	T3748	F3687	E3548	K3474	K3474	L3381	T4179
F4182	F4182	G3966	K4034	L3967	V3876	E3817	F3749	T3694	N3549	G3475	G3475	E3382	F4182
H4183	H4183	L3967	K4035	Q3968	I3877	Q3819	H3750	S3695	F3550	A3476	A3476	T3384	H4183
M4184	M4184	E3969	L4036	E3969	P3878	Q3819	V3751	T3696	E3553	V3477	V3477	T3385	M4184
K4185	K4185	G3970	T4037	E3970	I3883	L3820	P3752	T3699	I3559	G3478	G3478	R3386	K4185
V4186	V4186	E3971	F4039	G3972	T3884	S3822	F3753	R3698	L3562	H3479	H3479	R3387	V4186
K4187	K4187	G3973	K4040	K3973	A3885	Q3824	T3754	R3699	W3563	K3481	K3481	T3388	K4187
Q4188	Q4188	E3977	L4043	E3977	I3887	R3825	D3755	Q3700	K3630	S3482	S3482	R3389	Q4188
L4189	L4189	N3977	R4046	N3977	E3888	T3826	L3756	H3701	K3631	K3483	K3483	K3390	L4189
Y4190	Y4190	I3978	E4047	I3978	L3827	L3827	Q3757	L3702	R3632	E3484	E3484	K3391	Y4190
L4193	L4193	K3979	E4048	K3979	P3828	P3828	V3758	R3703	W3633	T3567	T3567	G3392	L4193
I4194	I4194	S3980	S4048	S3980	S3901	K3829	P3759	K3634	K3634	K3568	K3568	L3393	I4194
D4195	D4195	P3981	D4049	P3981	L3902	S3830	S3760	S3705	N3635	H3570	H3570	K3394	D4195
F4196	F4196	T3984	E4050	T3984	K3903	V3831	C3761	F3708	R3638	E3483	E3483	L3401	F4196
L4197	L4197	D3985	E4051	D3985	K3904	S3832	K3762	Y3709	I3639	S3494	S3494	S3402	L4197
N4198	N4198	L3986	F4052	L3986	K3905	D3833	L3763	Y3710	H3640	S3495	S3495	R3403	N4198
F4199	F4199	H3987	Q4053	H3987	A3906	D3834	D3764	T3711	S3641	T3496	T3496	K3404	F4199
P4200	P4200	L3988	Q4054	L3988	D3907	I3835	F3765	K3712	G3642	K3497	K3497	F3405	P4200
R4201	R4201	K3992	I4054	K3992	E3910	A3836	R3766	N3713	S3643	V3500	V3500	N3411	R4201
F4202	F4202	D3993	W4058	D3993	T3911	A3837	E3767	P3714	F3644	S3506	S3506	L3416	F4202
Q4203	Q4203	K3994	E4059	K3994	V3912	L3838	Q3769	G3716	S3646	R3507	R3507	T3417	Q4203
F4204	F4204	I3997	E4060	I3997	C3917	D3839	I3770	Y3717	Q3647	S3510	S3510	T3418	F4204
P4205	P4205	T3998	E4061	T3998	S3918	L3840	Y3771	F3718	V3648	G3511	G3511	K3419	P4205
G4206	G4206	T3999	A4062	T3999	S3919	N3841	K3772	F3719	L3650	L3512	L3512	A3426	G4206
K4207	K4207	S4000	A4063	S4000	T3920	V3842	T3776	S3720	S3651	A3514	A3514	T3427	K4207
P4208	P4208	A4001	S4064	A4001	V3921	A3842	S3777	I3721	D3653	L3589	L3589	T3428	P4208
G4209	G4209	S4003	G4065	S4003	Q3922	V3843	Q3778	P3722	Q3654	E3590	E3590	T3429	G4209
I4210	I4210	S4004	L4066	S4004	F3923	A3844	S3779	V3723	E3655	L3591	L3591	Q3432	I4210
Y4211	Y4211	A4005	T4067	A4005	L3924	N3845	F3779	K3724	A3657	N3522	N3522	R3437	Y4211
T4212	T4212	V4006	T4068	V4006	E3925	K3846	A3780	L3726	L3659	S3523	S3523	K3438	T4212
R4213	R4213	G4010	S4069	G4010	L3928	I3847	L3781	V3725	H3658	R3527	R3527	F3440	R4213
E4214	E4214	M4011	L4070	M4011	H3934	A3848	N3782	L3726	L3659	Q3595	Q3595	K3441	E4214
E4215	E4215	D4012	D4072	D4012	E3937	F3850	P3784	A3727	A3662				E4215
L4216	L4216	M4013	M4073	M4013	E3937	E3851	T3785	K3728					L4216
C4217	C4217	T4075	P4075	T4075	D3938	L3852	L3786	K3729					C4217
T4218	T4218	K4076	K4076	K4076	T3940	I3855	E3788	F3730					T4218
M4219	M4219	D4083	Y4084	D4083	L3941	I3856	V3789						M4219
F4220	F4220	Y4084		Y4084		V3857	K3790						F4220
I4221	I4221					P3858	F3791						I4221
E4222	E4222					E3859	F3792						E4222
V4283	V4283						E3793						V4283

L4554	F4284	K4357	L4418	S4479	L4554
A4555	K4285	K4358	K4419	Q4480	A4555
P4556	A4286	F4359	D4420	A4481	P4556
G4557	I4287	M4360	F4421	I4482	G4557
E4558	E4361	F4362	H4422	A4483	E4558
T4560	Q4288	I4363	S4423	T4484	T4560
	84289	Q4364	E4424		
	L4290	M4365	Y4425	I4488	
	K4291	E4366	I4426		
	T4292	L4367	V4427	Y4491	
	E4294	Q4368	S4428	Q4494	
	V4295	E4369	A4429	F4495	
	L4296	A4370	S4430	R4496	
	R4297	S4371	N4431	Y4497	
	M4298	Q4372	F4432	K4498	
	L4299	E4373	T4433	L4499	
	Q4300	L4374	S4434		
	D4301	Q4375	Q4435	F4502	
	L4302	Q4376	L4436	S4503	
	L4303	I4377	S4437	D4504	
	Q4304	H4378	S4438	Q4505	
	F4305	Q4379	Q4439	L4506	
	L4306	Y4380	V4440	Y4509	
		I4381	E4441	Y4510	
	I4310	M4382	Q4442	E4511	
	K4315	A4383	F4443	K4512	
		L4384	L4444	F4513	
	K4318	R4385	H4445	I4514	
	E4319	E4386	R4446	A4515	
	M4320	E4387	N4447		
	K4321	Y4388	I4448	L4520	
	F4322	D4389	Q4449	I4521	
	T4323	G4390	E4450		
	Y4324	P4391	Y4451	S4524	
	L4325	S4392	L4452	I4525	
	I4326	I4393	S4453	Q4526	
	M4327	V4394	I4454	M4527	
	Y4328	G4395	L4455	Y4528	
	I4329	W4396	T4456	H4529	
	Q4330	T4397	D4457	T4530	
	D4331	Y4398	P4458	F4531	
		K4399	D4459	L4532	
	F4337	Y4400	Q4460	I4533	
	S4338	Y4401	K4461	Y4534	
	D4339	E4402	G4462	I4535	
	Y4340	L4403	K4463		
	I4341	E4404	E4464	L4538	
	P4342		K4465	L4539	
	Y4343		I4466	K4540	
	K4346		A4467	K4541	
			E4468	L4542	
	E4350		L4469	Q4543	
	M4351			S4544	
	L4352		T4472	T4545	
	C4353		A4473		
	L4354		Q4474	Y4551	
	M4355		E4475	M4552	
	L4356		I4476	K4553	
			I4477		
			K4478		

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, C1	Depositor
Number of particles used	52843	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	TFS KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	800	Depositor
Maximum defocus (nm)	2800	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 (6k x 4k)	Depositor
Maximum map value	1.148	Depositor
Minimum map value	-0.560	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.025	Depositor
Recommended contour level	0.182	Depositor
Map size (Å)	490.5, 490.5, 490.5	wwPDB
Map dimensions	450, 450, 450	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.09, 1.09, 1.09	Depositor

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.15	0/36813	0.37	0/49814

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	36083	0	36243	1315	0
All	All	36083	0	36243	1315	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 18.

All (1315) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:825:PHE:O	1:A:857:GLY:HA2	1.68	0.93
1:A:3918:SER:HA	1:A:3925:GLU:HG2	1.52	0.92
1:A:322:ALA:O	1:A:325:VAL:HB	1.70	0.92
1:A:4138:THR:HG22	1:A:4142:GLN:HE22	1.37	0.88
1:A:3965:GLU:O	1:A:3969:GLU:HB2	1.73	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:352:VAL:HG23	1:A:356:ARG:HH22	1.41	0.86
1:A:1477:GLN:HG2	1:A:1478:HIS:H	1.41	0.85
1:A:144:TYR:HB3	1:A:302:GLY:H	1.41	0.85
1:A:1666:VAL:HG23	1:A:1689:ARG:HH21	1.39	0.85
1:A:536:PRO:HB3	1:A:540:ASP:HB2	1.58	0.84
1:A:175:GLN:HB3	1:A:190:PHE:HB3	1.59	0.84
1:A:1672:ASN:HB3	1:A:1683:LYS:HB3	1.60	0.83
1:A:896:ARG:HH12	1:A:945:VAL:HG12	1.42	0.82
1:A:116:THR:HG23	1:A:118:ASN:H	1.44	0.81
1:A:930:LYS:O	1:A:1006:ARG:NH2	2.14	0.81
1:A:389:GLN:NE2	1:A:390:CYS:SG	2.53	0.81
1:A:136:PRO:HD2	1:A:140:GLN:HB2	1.62	0.81
1:A:1775:SER:HB3	1:A:1778:LYS:HB3	1.61	0.81
1:A:2846:PHE:HB2	1:A:2849:ALA:HB3	1.62	0.81
1:A:2975:VAL:HB	1:A:2987:GLU:HB2	1.63	0.80
1:A:243:GLN:NE2	1:A:245:CYS:SG	2.53	0.80
1:A:529:GLN:OE1	1:A:532:ARG:NH2	2.14	0.80
1:A:801:MET:HG2	1:A:804:ARG:HH21	1.46	0.79
1:A:3069:ASP:OD2	1:A:3092:ARG:NH2	2.15	0.79
1:A:3530:VAL:O	1:A:3549:ASN:HA	1.83	0.79
1:A:1787:GLN:HB2	1:A:1794:VAL:HB	1.63	0.79
1:A:4543:GLN:HG3	1:A:4552:MET:HE3	1.65	0.79
1:A:1489:GLN:HB2	1:A:1491:ARG:HH12	1.46	0.78
1:A:77:ASN:O	1:A:97:CYS:HA	1.82	0.78
1:A:4021:LYS:HZ2	1:A:4040:LYS:HD3	1.47	0.78
1:A:3482:SER:HB3	1:A:3493:GLU:HB2	1.65	0.78
1:A:1585:ASN:ND2	1:A:1601:GLU:O	2.16	0.78
1:A:65:PRO:HA	1:A:69:ASP:HA	1.64	0.78
1:A:1094:LEU:HB2	1:A:1106:LEU:HB2	1.66	0.78
1:A:3111:MET:HE1	1:A:3179:LYS:HB2	1.66	0.77
1:A:343:GLN:HB3	1:A:346:ASN:HD21	1.49	0.77
1:A:3334:MET:HE3	1:A:3335:GLY:H	1.49	0.77
1:A:2793:ILE:HB	1:A:2810:ALA:HB3	1.67	0.77
1:A:1416:ASN:HB3	1:A:1443:LEU:HB2	1.65	0.77
1:A:3046:ILE:HB	1:A:3078:LEU:HB2	1.67	0.77
1:A:2973:ASN:HB3	1:A:2989:GLN:HB2	1.67	0.76
1:A:665:ASN:HD22	1:A:701:LEU:HD12	1.49	0.76
1:A:3001:VAL:HG12	1:A:3020:ARG:HH12	1.48	0.76
1:A:3280:MET:O	1:A:3294:SER:HA	1.86	0.76
1:A:2887:THR:HB	1:A:2908:ASN:HB2	1.66	0.76
1:A:3437:ARG:HB2	1:A:3463:ASP:HB3	1.66	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2844:LEU:HB2	1:A:2851:GLU:HB2	1.68	0.75
1:A:1204:LEU:HD13	1:A:1263:LEU:H	1.52	0.75
1:A:2791:ALA:HB3	1:A:2812:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:3537:LYS:HB3	1:A:3543:ASN:HB3	1.69	0.75
1:A:1905:MET:HB3	1:A:1935:ALA:HB3	1.68	0.75
1:A:3533:GLN:NE2	1:A:3535:THR:OG1	2.20	0.75
1:A:433:ALA:HB2	1:A:445:LEU:HD21	1.68	0.75
1:A:320:LYS:HD2	1:A:320:LYS:H	1.52	0.74
1:A:669:LYS:HD2	1:A:670:GLU:HG3	1.68	0.74
1:A:1865:SER:HB3	1:A:1884:ASN:HB2	1.69	0.74
1:A:428:GLU:HB3	1:A:432:MET:HE1	1.69	0.74
1:A:907:HIS:ND1	1:A:935:LEU:O	2.21	0.74
1:A:2699:GLU:O	1:A:2705:ARG:NH1	2.21	0.74
1:A:1164:ARG:HB2	1:A:1179:ASN:HB2	1.69	0.74
1:A:4488:ILE:HA	1:A:4491:TYR:CE1	2.23	0.74
1:A:1066:ILE:HB	1:A:1071:VAL:HB	1.70	0.74
1:A:1403:ASN:HB3	1:A:1427:ARG:HB2	1.69	0.74
1:A:1546:SER:HB3	1:A:1559:ALA:HB3	1.70	0.73
1:A:1815:ARG:HB2	1:A:1822:HIS:HB2	1.69	0.73
1:A:4371:SER:HB3	1:A:4412:LYS:HE2	1.69	0.73
1:A:1158:GLY:O	1:A:1188:LYS:NZ	2.20	0.73
1:A:3456:SER:HB3	1:A:3481:LEU:HB3	1.71	0.73
1:A:631:ARG:NH2	1:A:666:TYR:O	2.22	0.73
1:A:69:ASP:HB3	1:A:71:ARG:HH12	1.54	0.73
1:A:314:LYS:NZ	1:A:356:ARG:O	2.21	0.73
1:A:1666:VAL:HB	1:A:1689:ARG:HB3	1.71	0.73
1:A:2913:LEU:HB3	1:A:2920:ALA:HB3	1.69	0.73
1:A:100:LYS:HB3	1:A:113:LEU:HB3	1.71	0.73
1:A:145:PRO:HD2	1:A:304:LYS:HB2	1.69	0.73
1:A:431:ASN:OD1	1:A:434:ARG:NH2	2.21	0.73
1:A:1201:PRO:O	1:A:1205:HIS:ND1	2.22	0.73
1:A:1544:LEU:HB3	1:A:1561:LEU:HB2	1.71	0.73
1:A:1449:SER:HB2	1:A:1473:SER:HB3	1.71	0.72
1:A:396:GLN:HG3	1:A:399:LYS:HE2	1.72	0.72
1:A:4416:VAL:HA	1:A:4419:LYS:HE2	1.71	0.72
1:A:2961:ASN:HB3	1:A:2972:GLN:HB2	1.71	0.71
1:A:3669:LEU:HB2	1:A:3700:GLN:HG3	1.71	0.71
1:A:158:ARG:NH1	1:A:311:GLU:OE1	2.23	0.71
1:A:1434:ASN:HB3	1:A:1456:ASP:HB2	1.71	0.71
1:A:2915:LYS:HB2	1:A:2918:HIS:HB3	1.72	0.71
1:A:1944:HIS:HB3	1:A:1968:VAL:HB	1.72	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:327:LYS:O	1:A:330:GLN:HB3	1.90	0.71
1:A:880:SER:OG	1:A:882:GLU:OE2	2.08	0.71
1:A:324:ALA:HA	1:A:327:LYS:HE3	1.71	0.71
1:A:332:LEU:HD23	1:A:335:LEU:HD12	1.73	0.71
1:A:1532:GLN:HE22	1:A:1534:THR:HB	1.54	0.71
1:A:3612:ASP:HB2	1:A:3640:HIS:HA	1.72	0.71
1:A:3163:LYS:NZ	1:A:3346:SER:O	2.24	0.71
1:A:819:LYS:O	1:A:863:LYS:NZ	2.24	0.70
1:A:825:PHE:O	1:A:857:GLY:CA	2.38	0.70
1:A:838:LEU:HB2	1:A:846:LEU:HD11	1.72	0.70
1:A:1839:ILE:HB	1:A:1854:ASP:HB2	1.73	0.70
1:A:3676:ILE:HA	1:A:3683:SER:HA	1.72	0.70
1:A:3334:MET:HB3	1:A:3358:ASN:HB2	1.73	0.70
1:A:3427:THR:HB	1:A:3442:GLN:HB3	1.72	0.70
1:A:906:PHE:HB3	1:A:934:LYS:HZ1	1.57	0.70
1:A:938:GLY:N	1:A:1000:ARG:HH22	1.90	0.69
1:A:1702:LYS:HB3	1:A:1709:SER:HB3	1.73	0.69
1:A:2523:MET:HA	1:A:2526:MET:HG3	1.73	0.69
1:A:4118:GLY:HA2	1:A:4121:ARG:HE	1.56	0.69
1:A:703:ALA:HB1	1:A:764:ASP:HB3	1.74	0.69
1:A:2764:ILE:HD13	1:A:2771:LEU:HB3	1.75	0.69
1:A:601:LEU:HD23	1:A:612:LYS:HG2	1.73	0.69
1:A:1144:ALA:O	1:A:1349:GLN:NE2	2.26	0.69
1:A:1795:THR:H	1:A:1815:ARG:NH2	1.91	0.69
1:A:3071:LEU:HB2	1:A:3090:SER:HB3	1.75	0.69
1:A:807:GLN:HA	1:A:2232:PHE:HD1	1.56	0.69
1:A:1210:ARG:NH2	1:A:4545:THR:OG1	2.25	0.69
1:A:1795:THR:H	1:A:1815:ARG:HH21	1.38	0.69
1:A:1294:LEU:HB2	1:A:1350:VAL:HB	1.74	0.69
1:A:752:ASN:HA	1:A:755:MET:HG2	1.75	0.68
1:A:906:PHE:O	1:A:934:LYS:NZ	2.26	0.68
1:A:315:SER:OG	1:A:356:ARG:O	2.11	0.68
1:A:1658:THR:HB	1:A:1669:ASN:HB2	1.75	0.68
1:A:1911:THR:HB	1:A:1929:SER:HB3	1.75	0.68
1:A:675:THR:HG23	1:A:687:LEU:HB2	1.74	0.68
1:A:3614:PRO:HA	1:A:3638:ARG:O	1.94	0.68
1:A:1521:ARG:NH1	1:A:1522:PHE:O	2.27	0.68
1:A:1409:GLU:HB3	1:A:1421:SER:HB3	1.75	0.68
1:A:60:SER:OG	1:A:74:THR:OG1	2.11	0.68
1:A:3405:PHE:HA	1:A:3432:GLN:HB2	1.75	0.68
1:A:4555:ALA:HB3	1:A:4558:GLU:HB3	1.76	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2839:HIS:ND1	1:A:2855:ASN:O	2.26	0.67
1:A:3411:ASN:HB2	1:A:3426:ALA:HB3	1.76	0.67
1:A:1399:LEU:HA	1:A:1429:LYS:HE3	1.75	0.67
1:A:1608:SER:O	1:A:1610:ARG:NH1	2.27	0.67
1:A:1368:ASN:HB2	1:A:1394:ASP:HB3	1.76	0.67
1:A:2589:GLU:HA	1:A:2597:MET:O	1.93	0.67
1:A:2502:SER:HB3	1:A:2505:LEU:HD23	1.76	0.67
1:A:364:THR:HA	1:A:367:LEU:HD23	1.77	0.67
1:A:54:TYR:OH	1:A:256:VAL:O	2.13	0.67
1:A:1811:ASN:O	1:A:1840:TYR:OH	2.13	0.67
1:A:179:LEU:HD12	1:A:188:THR:HB	1.77	0.67
1:A:1870:THR:HG22	1:A:1871:ASP:H	1.58	0.67
1:A:934:LYS:NZ	1:A:937:SER:OG	2.27	0.67
1:A:1078:ARG:NH1	1:A:1079:VAL:O	2.28	0.67
1:A:1431:LEU:HA	1:A:1459:SER:HA	1.75	0.67
1:A:2608:GLN:O	1:A:2634:LYS:NZ	2.24	0.67
1:A:3514:ALA:HB3	1:A:3533:GLN:HB3	1.77	0.67
1:A:677:LEU:HB3	1:A:687:LEU:HD21	1.78	0.66
1:A:3418:THR:HA	1:A:3850:PHE:HA	1.78	0.66
1:A:332:LEU:HD21	1:A:347:LEU:HD11	1.76	0.66
1:A:2794:THR:HG23	1:A:2809:GLN:HG3	1.75	0.66
1:A:3507:ARG:HE	1:A:3539:ASP:HB3	1.61	0.66
1:A:876:LYS:HG3	1:A:910:GLY:HA3	1.78	0.66
1:A:1162:SER:OG	1:A:1164:ARG:NH1	2.28	0.66
1:A:1178:TRP:HZ3	1:A:1285:VAL:HG23	1.60	0.66
1:A:325:VAL:O	1:A:328:THR:HB	1.96	0.66
1:A:1218:GLN:NE2	1:A:4527:ASN:OD1	2.27	0.66
1:A:1289:LEU:HD22	1:A:1352:LEU:H	1.60	0.66
1:A:677:LEU:HD22	1:A:687:LEU:HD23	1.76	0.66
1:A:3818:SER:HB3	1:A:3864:ILE:HB	1.76	0.66
1:A:49:LEU:N	1:A:84:VAL:O	2.29	0.66
1:A:1111:SER:HB3	1:A:1119:LYS:HB2	1.76	0.66
1:A:2938:ASP:HA	1:A:2966:LYS:HD3	1.78	0.66
1:A:346:ASN:OD1	1:A:347:LEU:N	2.29	0.65
1:A:3543:ASN:O	1:A:3570:HIS:ND1	2.29	0.65
1:A:3628:ASN:HB2	1:A:3805:ASP:HB3	1.77	0.65
1:A:3665:LEU:O	1:A:3703:ARG:NH2	2.29	0.65
1:A:349:ASN:O	1:A:353:THR:OG1	2.13	0.65
1:A:1571:LYS:HZ3	1:A:1588:ASP:HB2	1.60	0.65
1:A:1838:HIS:HE1	1:A:1840:TYR:HB3	1.61	0.65
1:A:1000:ARG:HH21	1:A:1001:LEU:C	2.04	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1413:ASP:HB3	1:A:1417:THR:HB	1.77	0.65
1:A:2070:ASN:ND2	1:A:2075:GLU:OE2	2.27	0.65
1:A:603:SER:HB3	1:A:608:ILE:HD13	1.78	0.65
1:A:1385:LEU:HB3	1:A:1410:THR:HB	1.79	0.65
1:A:187:SER:H	1:A:207:ARG:HH21	1.42	0.65
1:A:328:THR:HG21	1:A:351:LEU:HD21	1.78	0.65
1:A:927:PRO:HA	1:A:1013:GLN:HB2	1.78	0.65
1:A:1112:CYS:HA	1:A:1118:ARG:HA	1.79	0.65
1:A:1823:VAL:HB	1:A:1842:ILE:HB	1.79	0.65
1:A:1954:LEU:HB2	1:A:1958:LYS:HB2	1.79	0.65
1:A:2665:PHE:HA	1:A:2668:MET:HE2	1.78	0.65
1:A:106:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	1.62	0.65
1:A:1022:LEU:HD11	1:A:1029:LEU:HB3	1.78	0.65
1:A:4105:ARG:HD2	1:A:4503:SER:HB3	1.77	0.65
1:A:755:MET:HE2	1:A:2201:ILE:HG22	1.78	0.64
1:A:1652:ILE:HB	1:A:1675:LEU:HB2	1.79	0.64
1:A:2833:LYS:O	1:A:2836:ARG:NH1	2.30	0.64
1:A:3512:THR:HG23	1:A:3533:GLN:HE22	1.63	0.64
1:A:3537:LYS:HD2	1:A:3540:ASP:HA	1.80	0.64
1:A:2519:THR:O	1:A:2523:MET:HG2	1.98	0.64
1:A:3656:LYS:HG2	1:A:3711:THR:HA	1.80	0.64
1:A:968:GLN:NE2	1:A:970:PHE:O	2.31	0.64
1:A:1041:GLY:O	1:A:1044:GLN:NE2	2.31	0.64
1:A:1813:LYS:HE3	1:A:1824:ALA:HB3	1.80	0.64
1:A:2614:THR:OG1	1:A:2629:VAL:N	2.27	0.64
1:A:49:LEU:HB2	1:A:293:LYS:HZ2	1.62	0.64
1:A:4109:GLN:O	1:A:4496:ARG:NH2	2.31	0.64
1:A:766:LYS:HE2	1:A:2215:HIS:HB3	1.79	0.63
1:A:3206:ARG:O	1:A:3209:GLU:HG3	1.98	0.63
1:A:3559:ILE:HB	1:A:3591:LEU:HB3	1.80	0.63
1:A:688:ILE:HD11	1:A:777:LEU:HD11	1.81	0.63
1:A:1513:ARG:HA	1:A:1538:GLU:HA	1.79	0.63
1:A:1661:LYS:NZ	1:A:1663:SER:O	2.31	0.63
1:A:3441:LYS:NZ	1:A:3443:GLU:OE1	2.31	0.63
1:A:3614:PRO:HG3	1:A:3639:ILE:HD13	1.79	0.63
1:A:3723:VAL:HG21	1:A:3811:PHE:HZ	1.63	0.63
1:A:460:THR:OG1	1:A:462:GLU:OE1	2.13	0.63
1:A:1136:GLU:HB2	1:A:1151:ASP:HB3	1.81	0.63
1:A:3783:LEU:HB3	1:A:3786:LEU:HD12	1.81	0.63
1:A:1813:LYS:HD3	1:A:1815:ARG:HG2	1.80	0.63
1:A:3079:SER:OG	1:A:3082:ALA:O	2.16	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:712:PRO:HA	1:A:738:PHE:HB3	1.81	0.63
1:A:959:ASN:HB3	1:A:983:ASN:HB3	1.80	0.63
1:A:3023:ALA:HB3	1:A:3033:LEU:HB2	1.79	0.63
1:A:3827:LEU:HB2	1:A:3855:ILE:HB	1.81	0.63
1:A:3954:PHE:HA	1:A:3979:LYS:O	1.98	0.63
1:A:1176:PHE:O	1:A:1285:VAL:N	2.27	0.63
1:A:1865:SER:O	1:A:1884:ASN:N	2.30	0.63
1:A:4173:ASP:OD1	1:A:4318:LYS:NZ	2.32	0.63
1:A:239:ILE:HG23	1:A:265:HIS:CE1	2.34	0.62
1:A:3745:VAL:HG22	1:A:3762:LYS:HG3	1.81	0.62
1:A:1381:ASP:HA	1:A:2591:LYS:HG2	1.82	0.62
1:A:1549:ASP:OD1	1:A:1556:LYS:NZ	2.33	0.62
1:A:496:GLY:HA3	1:A:534:MET:HG2	1.82	0.62
1:A:2760:SER:HB3	1:A:2775:ALA:HB3	1.81	0.62
1:A:246:GLN:HB2	1:A:260:ILE:HB	1.82	0.62
1:A:2454:ILE:HG23	1:A:2459:LEU:HD12	1.80	0.62
1:A:3079:SER:O	1:A:3083:GLN:NE2	2.32	0.62
1:A:4552:MET:HE1	1:A:4554:LEU:HB2	1.81	0.62
1:A:602:ASN:O	1:A:3232:LYS:NZ	2.30	0.62
1:A:817:ILE:HG12	1:A:2240:LYS:HD2	1.82	0.62
1:A:865:GLU:OE1	1:A:870:GLN:NE2	2.33	0.62
1:A:2616:ASP:HB2	1:A:2628:SER:HB3	1.81	0.62
1:A:4138:THR:O	1:A:4142:GLN:NE2	2.32	0.62
1:A:76:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB3	1.82	0.62
1:A:264:GLN:HE22	1:A:281:GLN:HB3	1.65	0.62
1:A:2860:LEU:N	1:A:2867:LEU:O	2.33	0.62
1:A:3248:ILE:O	1:A:3262:PRO:HA	1.99	0.61
1:A:3454:VAL:HB	1:A:3483:LEU:HB3	1.80	0.61
1:A:1641:HIS:ND1	1:A:1658:THR:OG1	2.29	0.61
1:A:3177:TYR:HE1	1:A:3337:ILE:HG12	1.63	0.61
1:A:213:ASP:HB3	1:A:214:ARG:HH11	1.65	0.61
1:A:2977:GLU:HB3	1:A:2985:LYS:HB2	1.82	0.61
1:A:3654:GLN:NE2	1:A:3805:ASP:O	2.33	0.61
1:A:3673:LYS:NZ	1:A:3693:THR:O	2.24	0.61
1:A:335:LEU:O	1:A:339:GLU:N	2.34	0.61
1:A:807:GLN:O	1:A:2235:ASN:ND2	2.31	0.61
1:A:932:PRO:HA	1:A:1005:LEU:O	2.00	0.61
1:A:3132:ILE:HB	1:A:3147:LEU:HB2	1.81	0.61
1:A:262:LYS:NZ	1:A:283:THR:OG1	2.33	0.61
1:A:3955:SER:OG	1:A:3957:GLU:OE2	2.18	0.61
1:A:1499:GLY:HA2	1:A:1522:PHE:HA	1.82	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2769:PHE:HE2	1:A:2771:LEU:HB2	1.65	0.61
1:A:3475:GLY:HA3	1:A:3500:VAL:HA	1.81	0.61
1:A:1977:GLN:HB2	1:A:2000:ASN:HB3	1.82	0.61
1:A:3101:ASN:HB2	1:A:3116:GLY:HA3	1.81	0.61
1:A:3712:LYS:HB2	1:A:3878:PRO:HB2	1.82	0.61
1:A:3117:ILE:HB	1:A:3171:LEU:HB3	1.83	0.61
1:A:3180:ASN:ND2	1:A:3333:ALA:O	2.34	0.61
1:A:3223:TYR:HE1	1:A:3306:VAL:HA	1.65	0.61
1:A:3345:SER:OG	1:A:3348:ILE:O	2.17	0.61
1:A:476:ASP:HB3	1:A:512:LYS:HD2	1.81	0.60
1:A:2836:ARG:HH22	1:A:2861:HIS:HB2	1.66	0.60
1:A:4055:LYS:NZ	1:A:4560:THR:OG1	2.34	0.60
1:A:3641:SER:O	1:A:3668:HIS:ND1	2.31	0.60
1:A:3986:LEU:HD13	1:A:4003:SER:HB2	1.83	0.60
1:A:4353:CYS:O	1:A:4357:HIS:ND1	2.35	0.60
1:A:1433:SER:HA	1:A:1457:ALA:HA	1.84	0.60
1:A:1821:LEU:HB3	1:A:1844:SER:HB3	1.84	0.60
1:A:3928:LEU:HD13	1:A:3949:PHE:HB2	1.84	0.60
1:A:142:PHE:HA	1:A:306:MET:O	2.02	0.60
1:A:2127:ASN:O	1:A:2130:ASN:ND2	2.32	0.60
1:A:3050:THR:HB	1:A:3074:TYR:HB3	1.83	0.60
1:A:3362:ILE:HB	1:A:3387:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:4243:PHE:HD2	1:A:4270:ARG:HE	1.49	0.60
1:A:1614:LEU:HB3	1:A:1629:ASP:HB2	1.83	0.60
1:A:1952:HIS:HB2	1:A:1960:ILE:HB	1.84	0.60
1:A:2145:LEU:HA	1:A:2149:TYR:HB2	1.82	0.60
1:A:207:ARG:NH1	1:A:208:ASP:O	2.35	0.59
1:A:1206:MET:SD	1:A:1210:ARG:NH2	2.75	0.59
1:A:1489:GLN:HB2	1:A:1491:ARG:NH1	2.15	0.59
1:A:1818:PRO:O	1:A:1820:LYS:NZ	2.35	0.59
1:A:2604:LEU:O	1:A:2608:GLN:HG2	2.01	0.59
1:A:3135:MET:SD	1:A:3144:THR:OG1	2.59	0.59
1:A:3393:LEU:HB2	1:A:3416:LEU:HD12	1.84	0.59
1:A:1684:LEU:HB3	1:A:1699:LEU:HB3	1.84	0.59
1:A:2793:ILE:O	1:A:2810:ALA:N	2.31	0.59
1:A:481:ASP:HB2	1:A:484:TYR:HB3	1.83	0.59
1:A:1177:GLU:OE1	1:A:1179:ASN:ND2	2.35	0.59
1:A:1644:THR:HB	1:A:1655:SER:HB2	1.84	0.59
1:A:1691:ARG:HE	1:A:4392:SER:HG	1.50	0.59
1:A:1942:PHE:HE2	1:A:1968:VAL:HG12	1.67	0.59
1:A:238:LEU:HD13	1:A:269:PRO:HG2	1.84	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:695:LYS:HE3	1:A:772:GLU:HB2	1.85	0.59
1:A:1738:LEU:HD23	1:A:1757:LEU:HD22	1.83	0.59
1:A:3595:GLN:OE1	1:A:3625:ASN:ND2	2.33	0.59
1:A:52:TYR:OH	1:A:253:ARG:NH1	2.36	0.59
1:A:676:THR:HA	1:A:686:ASP:HA	1.85	0.59
1:A:3188:ASN:O	1:A:3327:SER:OG	2.20	0.59
1:A:3788:GLU:N	1:A:3823:SER:OG	2.31	0.59
1:A:3917:CYS:O	1:A:3925:GLU:HA	2.01	0.59
1:A:344:ARG:O	1:A:347:LEU:HG	2.01	0.59
1:A:4361:GLU:OE2	1:A:4365:ASN:ND2	2.32	0.59
1:A:2795:ALA:HB3	1:A:2808:PHE:HB3	1.83	0.59
1:A:3925:GLU:H	1:A:3952:ARG:NH1	2.01	0.59
1:A:4098:ARG:NH1	1:A:4506:LEU:O	2.35	0.59
1:A:64:VAL:HG12	1:A:66:GLY:H	1.68	0.59
1:A:820:GLY:HA3	1:A:863:LYS:HG3	1.85	0.59
1:A:3123:LEU:HB2	1:A:3166:LYS:HA	1.84	0.59
1:A:69:ASP:HB3	1:A:71:ARG:NH1	2.18	0.59
1:A:246:GLN:N	1:A:260:ILE:O	2.32	0.59
1:A:826:PHE:CD1	1:A:857:GLY:HA3	2.37	0.59
1:A:1177:GLU:HA	1:A:1284:ARG:HA	1.85	0.59
1:A:2216:TYR:HB3	1:A:2218:ILE:HG13	1.85	0.59
1:A:2244:SER:O	1:A:2247:SER:OG	2.17	0.59
1:A:1866:HIS:ND1	1:A:1883:THR:OG1	2.35	0.59
1:A:1982:LYS:HB3	1:A:1984:LYS:HE2	1.85	0.58
1:A:3153:TRP:NE1	1:A:3165:THR:HA	2.18	0.58
1:A:3349:THR:HB	1:A:3371:SER:HB3	1.85	0.58
1:A:3036:SER:HB3	1:A:3051:ASN:HB2	1.85	0.58
1:A:807:GLN:HA	1:A:2232:PHE:CD1	2.38	0.58
1:A:901:MET:HA	1:A:942:LEU:HD13	1.86	0.58
1:A:1134:ARG:N	1:A:1153:SER:O	2.30	0.58
1:A:1434:ASN:N	1:A:1456:ASP:O	2.36	0.58
1:A:336:THR:HG23	1:A:337:ILE:HD12	1.85	0.58
1:A:1401:SER:O	1:A:1429:LYS:NZ	2.32	0.58
1:A:1867:ARG:HB2	1:A:1882:SER:HB3	1.86	0.58
1:A:3598:ALA:HB3	1:A:3622:LEU:HB3	1.84	0.58
1:A:396:GLN:HA	1:A:399:LYS:HG2	1.84	0.58
1:A:558:ARG:NH2	1:A:586:ASN:OD1	2.37	0.58
1:A:1167:TRP:HB2	1:A:1176:PHE:HD1	1.69	0.58
1:A:1463:PRO:HG3	1:A:1492:VAL:HG13	1.84	0.58
1:A:3077:PHE:HB3	1:A:3084:GLN:HG3	1.86	0.58
1:A:3710:TYR:CE2	1:A:3712:LYS:HB3	2.39	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2131:TRP:HD1	1:A:2358:MET:SD	2.27	0.58
1:A:2199:ALA:HB1	1:A:2286:LYS:HG3	1.86	0.58
1:A:945:VAL:HG22	1:A:950:THR:HG23	1.85	0.58
1:A:1130:GLN:NE2	1:A:1132:GLU:OE1	2.37	0.58
1:A:336:THR:O	1:A:859:LYS:NZ	2.36	0.58
1:A:710:PHE:HB2	1:A:761:LEU:HB2	1.86	0.58
1:A:2912:THR:HG1	1:A:2921:TRP:CD1	2.22	0.58
1:A:1614:LEU:N	1:A:1629:ASP:O	2.29	0.58
1:A:3984:THR:HG21	1:A:4005:ALA:HB2	1.84	0.58
1:A:443:TYR:O	1:A:447:HIS:ND1	2.37	0.57
1:A:1885:TYR:HB3	1:A:1892:PHE:HB3	1.86	0.57
1:A:1998:ALA:HA	1:A:2007:VAL:HG12	1.86	0.57
1:A:3357:PHE:HB2	1:A:3363:VAL:HB	1.86	0.57
1:A:234:PRO:O	1:A:238:LEU:HG	2.03	0.57
1:A:699:PRO:HB2	1:A:768:LYS:HD2	1.87	0.57
1:A:2870:SER:HB3	1:A:2888:LYS:HB3	1.86	0.57
1:A:3084:GLN:HA	1:A:3105:GLY:HA2	1.86	0.57
1:A:936:LEU:HB2	1:A:1003:LEU:HB3	1.86	0.57
1:A:192:VAL:HG11	1:A:195:ARG:HB2	1.87	0.57
1:A:1507:ARG:HA	1:A:1514:LEU:HA	1.85	0.57
1:A:1781:LYS:HB2	1:A:1800:ASP:HB2	1.85	0.57
1:A:3590:GLU:HB3	1:A:3597:SER:HB2	1.87	0.57
1:A:4397:THR:HB	1:A:4401:TYR:CZ	2.39	0.57
1:A:1390:HIS:HE2	1:A:1392:LYS:HB2	1.69	0.57
1:A:2414:GLU:HA	1:A:2745:HIS:HE1	1.70	0.57
1:A:2762:LEU:HD11	1:A:2773:ALA:HB3	1.86	0.57
1:A:3785:THR:OG1	1:A:3832:SER:O	2.23	0.57
1:A:1002:GLU:N	1:A:1002:GLU:OE1	2.38	0.57
1:A:1173:LYS:NZ	1:A:1288:THR:HB	2.19	0.57
1:A:1491:ARG:HG3	1:A:1496:TYR:HA	1.85	0.57
1:A:1521:ARG:NH2	1:A:1528:GLN:OE1	2.38	0.57
1:A:1658:THR:O	1:A:1669:ASN:N	2.32	0.57
1:A:3495:SER:OG	1:A:3497:LYS:NZ	2.36	0.57
1:A:4460:GLY:HA2	1:A:4463:LYS:HE2	1.87	0.57
1:A:2929:TRP:HB2	1:A:2931:TRP:CZ3	2.39	0.57
1:A:3259:GLU:HB3	1:A:3284:SER:HB2	1.86	0.57
1:A:4031:SER:HB3	1:A:4034:LYS:HE2	1.85	0.57
1:A:238:LEU:HD22	1:A:269:PRO:HG3	1.85	0.57
1:A:677:LEU:HD23	1:A:685:ALA:O	2.05	0.57
1:A:2614:THR:HG1	1:A:2629:VAL:H	1.52	0.57
1:A:3380:LYS:HB3	1:A:3402:SER:HB3	1.87	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3651:SER:HB2	1:A:3658:HIS:HB2	1.86	0.57
1:A:1940:PHE:HB3	1:A:1972:LEU:HB2	1.87	0.56
1:A:3250:GLY:CA	1:A:3260:VAL:O	2.53	0.56
1:A:3425:VAL:HB	1:A:3444:LEU:HB2	1.85	0.56
1:A:105:PHE:HA	1:A:111:ALA:HA	1.87	0.56
1:A:840:THR:HG22	1:A:846:LEU:HD23	1.85	0.56
1:A:2760:SER:N	1:A:2775:ALA:O	2.36	0.56
1:A:2811:ASN:HD21	1:A:2827:SER:HB3	1.70	0.56
1:A:4089:HIS:CE1	1:A:4095:LEU:HB2	2.40	0.56
1:A:43:ALA:HB2	1:A:168:PRO:HG3	1.88	0.56
1:A:258:GLU:OE1	1:A:287:LYS:HD2	2.06	0.56
1:A:434:ARG:HG2	1:A:469:TYR:CZ	2.40	0.56
1:A:813:ILE:HA	1:A:816:VAL:HG22	1.86	0.56
1:A:975:TYR:CE2	1:A:1003:LEU:HD11	2.40	0.56
1:A:1000:ARG:NH2	1:A:1001:LEU:O	2.35	0.56
1:A:2053:THR:HB	1:A:2765:GLN:HB2	1.86	0.56
1:A:2271:ARG:O	1:A:2275:ASN:ND2	2.28	0.56
1:A:587:GLU:O	1:A:591:ASN:ND2	2.37	0.56
1:A:735:VAL:HG22	1:A:740:TYR:HB3	1.88	0.56
1:A:970:PHE:CD1	1:A:971:PRO:HD2	2.41	0.56
1:A:1668:GLU:HG2	1:A:1670:GLU:OE1	2.05	0.56
1:A:1712:SER:HB3	1:A:1727:PHE:HB2	1.87	0.56
1:A:267:PHE:CE1	1:A:269:PRO:HD2	2.40	0.56
1:A:875:ALA:C	1:A:876:LYS:HD2	2.31	0.56
1:A:2875:VAL:HB	1:A:2883:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:3348:ILE:HD12	1:A:3372:SER:HB2	1.87	0.56
1:A:3541:ILE:HG12	1:A:3573:LEU:HG	1.87	0.56
1:A:1477:GLN:HG2	1:A:1478:HIS:N	2.17	0.56
1:A:3621:ALA:HB3	1:A:3632:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:1167:TRP:CH2	1:A:1169:TYR:HB2	2.40	0.56
1:A:1174:ILE:HB	1:A:1287:TYR:HD2	1.70	0.56
1:A:1909:ALA:HB3	1:A:1931:PHE:HB3	1.88	0.56
1:A:777:LEU:HD23	1:A:784:LEU:HD21	1.86	0.56
1:A:3006:GLY:HA2	1:A:3017:PHE:HA	1.88	0.56
1:A:3594:TRP:O	1:A:3625:ASN:ND2	2.38	0.56
1:A:1140:HIS:HB3	1:A:1147:LEU:HB3	1.88	0.56
1:A:2186:LYS:HE2	1:A:2299:ASP:HA	1.87	0.56
1:A:2431:ASP:HB3	1:A:2434:GLN:HB3	1.88	0.55
1:A:2614:THR:HG1	1:A:2629:VAL:N	2.04	0.55
1:A:3643:SER:OG	1:A:3645:GLN:NE2	2.40	0.55
1:A:3988:LEU:HD13	1:A:4001:ALA:HB2	1.88	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:393:HIS:HA	1:A:396:GLN:OE1	2.07	0.55
1:A:1280:LYS:NZ	1:A:1282:ASP:OD1	2.39	0.55
1:A:1520:LEU:HB3	1:A:1531:ASN:HB3	1.89	0.55
1:A:943:HIS:ND1	1:A:952:VAL:HA	2.21	0.55
1:A:3199:GLN:O	1:A:3202:LYS:HG2	2.07	0.55
1:A:1481:VAL:HG13	1:A:1506:GLN:HE22	1.71	0.55
1:A:1586:LYS:N	1:A:1601:GLU:OE2	2.40	0.55
1:A:2959:LEU:HB2	1:A:2974:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:3549:ASN:OD1	1:A:3550:PHE:N	2.40	0.55
1:A:3922:GLN:OE1	1:A:3922:GLN:N	2.39	0.55
1:A:79:LYS:NZ	1:A:81:GLU:OE2	2.37	0.55
1:A:181:THR:HG23	1:A:183:TYR:H	1.71	0.55
1:A:331:GLU:O	1:A:335:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:2881:LEU:HB2	1:A:2914:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:3568:LYS:HE2	1:A:3583:HIS:HB3	1.87	0.55
1:A:120:GLU:CD	1:A:120:GLU:H	2.14	0.55
1:A:141:VAL:HG21	1:A:308:LEU:HD22	1.88	0.55
1:A:470:LEU:HD12	1:A:492:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:697:PHE:HZ	1:A:773:ALA:HB2	1.71	0.55
1:A:2759:TYR:HD2	1:A:2761:ILE:HG13	1.71	0.55
1:A:2772:ASP:OD1	1:A:2772:ASP:N	2.39	0.55
1:A:3074:TYR:CE2	1:A:3076:LEU:HB2	2.41	0.55
1:A:3705:SER:O	1:A:3886:ARG:NH1	2.39	0.55
1:A:3937:GLU:HG2	1:A:3940:THR:HB	1.89	0.55
1:A:549:LEU:HD22	1:A:580:ILE:HG21	1.89	0.55
1:A:1970:ALA:HA	1:A:1979:GLY:HA2	1.89	0.55
1:A:129:TYR:CD1	1:A:149:GLU:HG2	2.42	0.55
1:A:324:ALA:O	1:A:327:LYS:HG2	2.07	0.55
1:A:1152:SER:HB3	1:A:1163:LYS:HD2	1.89	0.55
1:A:1656:ALA:HB3	1:A:1671:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:1716:ALA:HB1	1:A:1718:ILE:HG12	1.89	0.55
1:A:1852:LYS:NZ	1:A:1854:ASP:OD2	2.40	0.55
1:A:2850:ILE:HB	1:A:2877:ILE:HB	1.89	0.55
1:A:3034:LYS:HB3	1:A:3053:GLU:HB2	1.88	0.55
1:A:405:PRO:HA	1:A:408:ILE:HG12	1.89	0.54
1:A:883:PHE:HE2	1:A:901:MET:HE1	1.72	0.54
1:A:1837:LYS:NZ	1:A:1838:HIS:O	2.40	0.54
1:A:2001:THR:OG1	1:A:2003:ASP:OD1	2.22	0.54
1:A:3629:GLN:HB2	1:A:3652:ASN:HB3	1.88	0.54
1:A:2618:ILE:HD12	1:A:2625:ARG:HD2	1.89	0.54
1:A:756:LEU:HD21	1:A:2201:ILE:HD12	1.89	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:975:TYR:HA	1:A:1005:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:1476:LYS:HG3	1:A:1477:GLN:OE1	2.07	0.54
1:A:580:ILE:HG22	1:A:584:GLU:HG2	1.88	0.54
1:A:1061:SER:OG	1:A:1063:GLU:OE2	2.20	0.54
1:A:1200:TYR:HB3	1:A:1201:PRO:HD3	1.89	0.54
1:A:1726:ILE:HB	1:A:1741:ASP:HB2	1.89	0.54
1:A:2997:VAL:O	1:A:3026:ASN:N	2.41	0.54
1:A:3780:ALA:HB2	1:A:3790:LYS:HG2	1.90	0.54
1:A:176:VAL:HA	1:A:188:THR:O	2.08	0.54
1:A:207:ARG:NH1	1:A:212:CYS:SG	2.81	0.54
1:A:2054:ILE:HG13	1:A:2764:ILE:HG13	1.90	0.54
1:A:4026:TYR:HB3	1:A:4038:ILE:HD11	1.90	0.54
1:A:569:PRO:HG2	1:A:574:ILE:HD11	1.88	0.54
1:A:818:ARG:NH2	1:A:2237:ASP:OD1	2.36	0.54
1:A:1866:HIS:HA	1:A:1883:THR:HA	1.89	0.54
1:A:3352:THR:HA	1:A:3368:SER:HA	1.89	0.54
1:A:3733:PRO:HA	1:A:3767:GLU:HG2	1.90	0.54
1:A:4033:ASP:OD1	1:A:4034:LYS:N	2.39	0.54
1:A:844:LEU:HB3	1:A:889:ILE:HD11	1.90	0.54
1:A:942:LEU:HB3	1:A:953:ILE:HD12	1.89	0.54
1:A:1286:LYS:HE3	1:A:1357:ASP:HB3	1.90	0.54
1:A:1982:LYS:HZ1	1:A:1997:ASP:CG	2.16	0.54
1:A:3394:LYS:HG2	1:A:3416:LEU:H	1.73	0.54
1:A:675:THR:O	1:A:687:LEU:N	2.41	0.54
1:A:207:ARG:O	1:A:242:SER:OG	2.22	0.54
1:A:883:PHE:HB3	1:A:903:THR:OG1	2.08	0.54
1:A:896:ARG:NH1	1:A:945:VAL:O	2.40	0.54
1:A:91:ILE:HD11	1:A:299:PHE:HD1	1.73	0.54
1:A:99:LEU:HG	1:A:119:SER:HB2	1.90	0.54
1:A:1531:ASN:HD21	1:A:1533:ILE:HG12	1.73	0.54
1:A:1536:ARG:HB2	1:A:1543:SER:HB2	1.90	0.54
1:A:3050:THR:O	1:A:3074:TYR:N	2.40	0.54
1:A:3964:TYR:OH	1:A:3967:LEU:O	2.24	0.54
1:A:1006:ARG:HH21	1:A:1007:PRO:HG2	1.73	0.53
1:A:2906:LEU:HD13	1:A:2927:GLY:HA3	1.89	0.53
1:A:3250:GLY:HA2	1:A:3260:VAL:O	2.07	0.53
1:A:3827:LEU:HB3	1:A:3828:PRO:HD2	1.90	0.53
1:A:102:VAL:HA	1:A:112:LEU:O	2.08	0.53
1:A:3016:GLU:HG2	1:A:3040:SER:HA	1.89	0.53
1:A:904:ASN:OD1	1:A:905:PHE:N	2.42	0.53
1:A:1453:LEU:HB3	1:A:1469:VAL:HB	1.90	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4382:MET:HE2	1:A:4382:MET:HA	1.89	0.53
1:A:707:LYS:HG3	1:A:708:GLN:HG3	1.90	0.53
1:A:3337:ILE:HD12	1:A:3356:LEU:HD23	1.91	0.53
1:A:67:THR:HG23	1:A:70:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:335:LEU:HA	1:A:338:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:670:GLU:HB3	1:A:672:MET:HE1	1.90	0.53
1:A:1178:TRP:CZ3	1:A:1285:VAL:HG23	2.43	0.53
1:A:1692:GLU:HB3	1:A:4392:SER:HB2	1.91	0.53
1:A:2786:GLU:HA	1:A:2817:PRO:HA	1.90	0.53
1:A:76:ILE:HD12	1:A:77:ASN:H	1.73	0.53
1:A:548:PHE:CE1	1:A:562:TYR:HB2	2.43	0.53
1:A:1424:GLY:N	1:A:1435:ILE:O	2.35	0.53
1:A:352:VAL:HB	1:A:356:ARG:HH12	1.73	0.53
1:A:460:THR:H	1:A:463:LEU:HD13	1.73	0.53
1:A:1096:ILE:HB	1:A:1104:VAL:HB	1.91	0.53
1:A:3215:ALA:O	1:A:3219:VAL:HG23	2.09	0.53
1:A:891:ILE:HG22	1:A:894:PHE:HB2	1.90	0.53
1:A:903:THR:HA	1:A:939:GLY:O	2.09	0.53
1:A:1273:ILE:HD12	1:A:1277:LEU:HD11	1.91	0.53
1:A:2467:LYS:HE2	1:A:2712:ARG:HB3	1.91	0.53
1:A:2855:ASN:ND2	1:A:2871:ASN:O	2.42	0.53
1:A:2886:ASN:OD1	1:A:2887:THR:N	2.42	0.53
1:A:2672:ILE:O	1:A:2676:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:2757:LYS:NZ	1:A:2759:TYR:HB3	2.23	0.52
1:A:3003:THR:HB	1:A:3020:ARG:NH2	2.24	0.52
1:A:599:ASN:ND2	1:A:636:ASN:OD1	2.36	0.52
1:A:1116:GLU:HA	1:A:1141:TRP:HB3	1.91	0.52
1:A:1185:ASP:HB2	1:A:1188:LYS:HE3	1.91	0.52
1:A:1507:ARG:HD2	1:A:1514:LEU:HD12	1.90	0.52
1:A:349:ASN:OD1	1:A:350:LYS:N	2.43	0.52
1:A:1445:ASN:OD1	1:A:1446:ASN:N	2.41	0.52
1:A:3789:VAL:HA	1:A:3821:THR:O	2.09	0.52
1:A:691:GLY:HA3	1:A:776:TYR:CE1	2.45	0.52
1:A:847:GLN:HG2	1:A:890:ILE:HG12	1.91	0.52
1:A:1126:ILE:HG22	1:A:1129:LEU:H	1.74	0.52
1:A:3547:LYS:HE2	1:A:3549:ASN:HB3	1.91	0.52
1:A:845:GLN:OE1	1:A:892:PRO:HD3	2.10	0.52
1:A:2523:MET:SD	1:A:2676:ILE:HG23	2.50	0.52
1:A:3705:SER:C	1:A:3886:ARG:HH12	2.17	0.52
1:A:1966:HIS:CE1	1:A:1981:TRP:HB3	2.45	0.52
1:A:57:GLU:HA	1:A:76:ILE:O	2.10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3482:SER:OG	1:A:3484:GLU:OE2	2.28	0.52
1:A:267:PHE:HB3	1:A:278:MET:HB3	1.91	0.52
1:A:1173:LYS:HZ1	1:A:1288:THR:HB	1.74	0.52
1:A:1514:LEU:N	1:A:1537:TYR:O	2.42	0.52
1:A:1582:ALA:HB3	1:A:1605:ASP:HB3	1.91	0.52
1:A:1738:LEU:HB3	1:A:1757:LEU:HB2	1.91	0.52
1:A:2190:ASP:N	1:A:2190:ASP:OD1	2.43	0.52
1:A:2500:LEU:HD12	1:A:2686:TRP:HB3	1.92	0.52
1:A:2930:LYS:HB3	1:A:2939:GLU:HG3	1.92	0.52
1:A:3603:HIS:HB3	1:A:3616:LEU:HB3	1.92	0.52
1:A:3819:GLN:N	1:A:3819:GLN:OE1	2.42	0.52
1:A:529:GLN:HB2	1:A:532:ARG:HH21	1.74	0.52
1:A:934:LYS:HA	1:A:1004:GLU:HA	1.91	0.52
1:A:1855:THR:H	1:A:1867:ARG:HH21	1.57	0.52
1:A:2750:ILE:HG22	1:A:2752:VAL:HG23	1.92	0.52
1:A:2888:LYS:HD2	1:A:2907:ARG:NH2	2.25	0.52
1:A:2967:HIS:HA	1:A:2995:GLN:HE22	1.75	0.52
1:A:3687:PHE:CE1	1:A:4092:HIS:HB3	2.45	0.52
1:A:759:GLU:HG2	1:A:2208:LYS:HE2	1.92	0.51
1:A:3253:VAL:O	1:A:3257:ASN:N	2.43	0.51
1:A:3548:GLU:HA	1:A:3564:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:3822:VAL:O	1:A:3859:GLU:HA	2.09	0.51
1:A:195:ARG:HA	1:A:200:ALA:HA	1.91	0.51
1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ASP:H	1.75	0.51
1:A:813:ILE:HG13	1:A:2240:LYS:HD3	1.91	0.51
1:A:1683:LYS:NZ	1:A:1685:THR:OG1	2.41	0.51
1:A:1811:ASN:N	1:A:1826:ASN:O	2.41	0.51
1:A:4422:HIS:O	1:A:4426:ILE:HG12	2.10	0.51
1:A:2763:LYS:HG3	1:A:2765:GLN:HE22	1.76	0.51
1:A:3007:MET:HE3	1:A:3008:ALA:N	2.24	0.51
1:A:938:GLY:H	1:A:1000:ARG:HH22	1.59	0.51
1:A:1171:GLU:HG2	1:A:1295:LYS:HZ2	1.75	0.51
1:A:1524:SER:HB3	1:A:1527:LEU:HB3	1.92	0.51
1:A:3626:THR:OG1	1:A:3627:LYS:N	2.42	0.51
1:A:4021:LYS:HG3	1:A:4023:ASN:HD21	1.76	0.51
1:A:4472:THR:O	1:A:4475:GLU:HG3	2.10	0.51
1:A:1641:HIS:C	1:A:1642:LYS:HD3	2.35	0.51
1:A:1991:GLU:HG2	1:A:2012:ARG:HH22	1.76	0.51
1:A:2668:MET:O	1:A:2672:ILE:HG12	2.11	0.51
1:A:3005:LYS:O	1:A:3018:THR:N	2.40	0.51
1:A:3040:SER:HG	1:A:3042:GLN:HE21	1.57	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:225:LEU:HB3	1:A:829:TYR:HE1	1.75	0.51
1:A:885:THR:OG1	1:A:901:MET:HB3	2.10	0.51
1:A:2649:GLU:HG2	1:A:2660:SER:N	2.24	0.51
1:A:497:GLN:O	1:A:501:GLN:HG2	2.11	0.51
1:A:2105:ASP:O	1:A:2109:ARG:HD3	2.10	0.51
1:A:2780:GLY:N	1:A:2788:GLY:O	2.32	0.51
1:A:3110:ILE:HG13	1:A:3178:LYS:HA	1.91	0.51
1:A:3824:GLN:NE2	1:A:3856:ILE:HG23	2.26	0.51
1:A:347:LEU:O	1:A:351:LEU:HD23	2.10	0.51
1:A:599:ASN:O	1:A:638:GLN:NE2	2.44	0.51
1:A:654:LYS:O	1:A:675:THR:HA	2.11	0.51
1:A:896:ARG:NH1	1:A:945:VAL:HG12	2.21	0.51
1:A:2268:GLN:O	1:A:2271:ARG:HG2	2.11	0.51
1:A:1415:LYS:O	1:A:1415:LYS:HD3	2.11	0.51
1:A:1596:ALA:HB3	1:A:1619:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:2017:LEU:HA	1:A:2046:VAL:HA	1.93	0.51
1:A:3149:ASP:O	1:A:3155:LYS:NZ	2.30	0.51
1:A:225:LEU:HB3	1:A:829:TYR:CE1	2.46	0.50
1:A:1120:ILE:HB	1:A:1137:ILE:HB	1.93	0.50
1:A:3365:HIS:ND1	1:A:3383:GLY:O	2.44	0.50
1:A:144:TYR:HB3	1:A:302:GLY:N	2.19	0.50
1:A:379:LEU:HD21	1:A:397:TRP:CZ2	2.46	0.50
1:A:846:LEU:HD12	1:A:846:LEU:O	2.12	0.50
1:A:1712:SER:N	1:A:1727:PHE:O	2.37	0.50
1:A:1956:SER:O	1:A:1957:ARG:HD3	2.11	0.50
1:A:3111:MET:SD	1:A:3111:MET:N	2.84	0.50
1:A:346:ASN:HA	1:A:349:ASN:HD21	1.76	0.50
1:A:3067:LYS:CB	1:A:3092:ARG:HH12	2.24	0.50
1:A:3253:VAL:O	1:A:3257:ASN:HA	2.11	0.50
1:A:827:LEU:O	1:A:855:ALA:HA	2.12	0.50
1:A:1838:HIS:CE1	1:A:1840:TYR:HB3	2.43	0.50
1:A:1908:ASP:HB3	1:A:1910:HIS:HE1	1.76	0.50
1:A:3999:THR:HB	1:A:4011:MET:SD	2.51	0.50
1:A:4038:ILE:HD13	1:A:4062:ALA:HB1	1.92	0.50
1:A:45:ARG:HG3	1:A:166:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:382:LEU:HD13	1:A:394:ILE:HD13	1.92	0.50
1:A:2905:ASP:OD1	1:A:2907:ARG:NH2	2.42	0.50
1:A:328:THR:HA	1:A:331:GLU:HG2	1.93	0.50
1:A:2766:SER:OG	1:A:2769:PHE:O	2.27	0.50
1:A:3976:LEU:HD21	1:A:3988:LEU:HD23	1.92	0.50
1:A:427:ARG:NH1	1:A:462:GLU:HB3	2.27	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:484:TYR:O	1:A:488:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:1288:THR:OG1	1:A:1355:VAL:N	2.44	0.50
1:A:1749:MET:SD	1:A:1749:MET:N	2.85	0.50
1:A:59:GLU:HB2	1:A:75:ARG:NH2	2.27	0.50
1:A:526:ALA:O	1:A:529:GLN:NE2	2.44	0.50
1:A:2889:TYR:H	1:A:2907:ARG:HH21	1.60	0.50
1:A:3031:GLY:HA3	1:A:3056:LEU:HD13	1.94	0.50
1:A:3060:PHE:HE2	1:A:3066:GLY:HA3	1.77	0.50
1:A:3464:PHE:HB3	1:A:3473:ALA:HB3	1.92	0.50
1:A:3510:SER:HB2	1:A:3537:LYS:HG2	1.93	0.50
1:A:427:ARG:HH22	1:A:466:ILE:HD11	1.77	0.50
1:A:1789:GLN:HE22	1:A:1794:VAL:HG23	1.76	0.50
1:A:3992:LYS:HG3	1:A:3997:ILE:HG12	1.94	0.50
1:A:4006:VAL:O	1:A:4026:TYR:OH	2.25	0.50
1:A:345:ALA:HB3	1:A:882:GLU:HG3	1.93	0.49
1:A:605:GLU:HB2	1:A:608:ILE:HG22	1.93	0.49
1:A:838:LEU:O	1:A:846:LEU:HG	2.11	0.49
1:A:1691:ARG:NE	1:A:4392:SER:OG	2.35	0.49
1:A:2757:LYS:HZ3	1:A:2759:TYR:HB3	1.77	0.49
1:A:3200:SER:O	1:A:3203:SER:OG	2.23	0.49
1:A:3263:PHE:CE1	1:A:3280:MET:HB2	2.46	0.49
1:A:3532:LEU:HB2	1:A:3548:GLU:HB2	1.94	0.49
1:A:1632:GLY:O	1:A:1639:GLY:N	2.33	0.49
1:A:2953:PRO:HB2	1:A:2980:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:3649:GLU:OE2	1:A:3651:SER:OG	2.27	0.49
1:A:137:GLU:HG2	1:A:139:LYS:HG2	1.94	0.49
1:A:1507:ARG:HH12	1:A:1509:PRO:HB3	1.78	0.49
1:A:2351:ASP:OD1	1:A:2351:ASP:N	2.43	0.49
1:A:92:LEU:HD12	1:A:131:LEU:HD23	1.92	0.49
1:A:207:ARG:HH22	1:A:211:GLN:C	2.20	0.49
1:A:830:ILE:HD12	1:A:853:VAL:HG22	1.95	0.49
1:A:927:PRO:HA	1:A:1013:GLN:CB	2.43	0.49
1:A:1693:HIS:CD2	1:A:1719:LEU:H	2.30	0.49
1:A:1928:TYR:HB2	1:A:1947:LYS:HB2	1.94	0.49
1:A:2624:LEU:HG	1:A:2648:PRO:HB3	1.94	0.49
1:A:3439:ASN:HB2	1:A:3461:LYS:HE3	1.94	0.49
1:A:3664:SER:HA	1:A:3703:ARG:HE	1.78	0.49
1:A:3828:PRO:HA	1:A:3840:LEU:HD12	1.93	0.49
1:A:355:LEU:HA	1:A:358:LEU:HD12	1.95	0.49
1:A:399:LYS:HD3	1:A:432:MET:SD	2.51	0.49
1:A:409:ASP:HB3	1:A:440:ALA:HB3	1.95	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1642:LYS:N	1:A:1657:THR:O	2.28	0.49
1:A:2911:LYS:NZ	1:A:2912:THR:O	2.43	0.49
1:A:3389:ARG:NH1	1:A:3849:ASP:OD2	2.46	0.49
1:A:814:GLY:O	1:A:817:ILE:HG13	2.11	0.49
1:A:1657:THR:HG23	1:A:1670:GLU:HG3	1.94	0.49
1:A:3831:VAL:HG23	1:A:3838:LEU:HB3	1.95	0.49
1:A:526:ALA:HA	1:A:529:GLN:HG3	1.94	0.49
1:A:1152:SER:H	1:A:1164:ARG:NH2	2.11	0.49
1:A:1880:ASP:HB2	1:A:1897:ARG:HH11	1.77	0.49
1:A:1917:LEU:HB3	1:A:1923:HIS:HB2	1.95	0.49
1:A:4243:PHE:HB2	1:A:4270:ARG:HH21	1.78	0.49
1:A:4382:MET:SD	1:A:4401:TYR:HB3	2.53	0.49
1:A:1612:PHE:CE2	1:A:1614:LEU:HB2	2.48	0.49
1:A:1966:HIS:HE1	1:A:1981:TRP:HB3	1.78	0.49
1:A:3572:GLN:HG3	1:A:3574:GLU:H	1.78	0.49
1:A:3953:ASP:C	1:A:3981:PRO:HD2	2.37	0.49
1:A:497:GLN:HG2	1:A:498:THR:N	2.28	0.49
1:A:748:GLN:HB3	1:A:752:ASN:HB2	1.94	0.49
1:A:810:PRO:HB2	1:A:2235:ASN:O	2.11	0.49
1:A:1312:MET:HE3	1:A:1312:MET:HA	1.94	0.49
1:A:2862:THR:HG23	1:A:2865:ASN:H	1.78	0.49
1:A:156:ILE:O	1:A:160:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:914:HIS:N	1:A:925:ILE:O	2.45	0.48
1:A:1133:ALA:HA	1:A:1154:ALA:HA	1.95	0.48
1:A:1301:PRO:HG2	1:A:2572:ASP:HA	1.95	0.48
1:A:1506:GLN:O	1:A:1515:ASN:N	2.42	0.48
1:A:1731:VAL:HG22	1:A:1736:LEU:HD13	1.93	0.48
1:A:3298:ILE:HD13	1:A:3313:LEU:HD13	1.95	0.48
1:A:3507:ARG:NH2	1:A:3539:ASP:O	2.46	0.48
1:A:990:ALA:HB1	1:A:996:THR:HG21	1.95	0.48
1:A:3567:THR:C	1:A:3568:LYS:HD3	2.38	0.48
1:A:59:GLU:OE2	1:A:61:SER:HB3	2.14	0.48
1:A:157:LYS:O	1:A:161:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:176:VAL:HA	1:A:189:HIS:HA	1.93	0.48
1:A:272:TYR:HE2	1:A:995:LEU:HG	1.77	0.48
1:A:481:ASP:O	1:A:485:THR:OG1	2.23	0.48
1:A:778:ARG:NH1	1:A:783:GLU:OE2	2.45	0.48
1:A:1218:GLN:OE1	1:A:4526:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:3076:LEU:HD21	1:A:3078:LEU:HG	1.94	0.48
1:A:429:ILE:HG12	1:A:445:LEU:HD22	1.95	0.48
1:A:900:GLN:O	1:A:902:ASN:ND2	2.46	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2038:ASP:HB2	1:A:4252:THR:HB	1.95	0.48
1:A:2888:LYS:NZ	1:A:2890:PHE:HB2	2.28	0.48
1:A:3669:LEU:HB3	1:A:3672:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:3703:ARG:HB2	1:A:3890:ASP:HB3	1.95	0.48
1:A:140:GLN:HB3	1:A:142:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:1247:TYR:CE1	1:A:1272:HIS:HA	2.49	0.48
1:A:1741:ASP:OD1	1:A:1754:THR:OG1	2.25	0.48
1:A:2797:GLY:HA3	1:A:2806:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:141:VAL:HG11	1:A:308:LEU:HD13	1.95	0.48
1:A:396:GLN:HA	1:A:399:LYS:HE2	1.94	0.48
1:A:1576:GLY:C	1:A:1577:LYS:HD3	2.39	0.48
1:A:2523:MET:SD	1:A:2676:ILE:HD12	2.52	0.48
1:A:499:MET:HE1	1:A:507:LYS:HD3	1.94	0.48
1:A:844:LEU:HD12	1:A:891:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:900:GLN:O	1:A:942:LEU:HA	2.13	0.48
1:A:1405:GLN:HE21	1:A:1425:SER:HB3	1.78	0.48
1:A:2543:TYR:HE2	1:A:2610:ALA:HB2	1.78	0.48
1:A:2929:TRP:HZ2	1:A:2965:SER:HB2	1.78	0.48
1:A:3205:ASP:HB3	1:A:3314:LYS:HD2	1.96	0.48
1:A:48:HIS:O	1:A:50:ARG:NH1	2.47	0.48
1:A:361:GLU:O	1:A:364:THR:HG22	2.13	0.48
1:A:672:MET:SD	1:A:672:MET:N	2.87	0.48
1:A:883:PHE:CE2	1:A:901:MET:HE1	2.49	0.48
1:A:2527:ASP:HB3	1:A:2669:LYS:HE3	1.94	0.48
1:A:3212:ARG:O	1:A:3216:LEU:N	2.38	0.48
1:A:3045:GLU:OE2	1:A:3047:THR:OG1	2.24	0.48
1:A:4103:LYS:O	1:A:4106:ARG:HG3	2.13	0.48
1:A:4117:GLN:O	1:A:4121:ARG:HG2	2.14	0.48
1:A:4184:MET:HE1	1:A:4185:LYS:HE3	1.96	0.48
1:A:49:LEU:H	1:A:85:PRO:HA	1.79	0.48
1:A:2059:LYS:HB2	1:A:2759:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:2906:LEU:O	1:A:2907:ARG:NH2	2.47	0.48
1:A:217:PRO:HA	1:A:838:LEU:HD21	1.95	0.47
1:A:369:GLN:O	1:A:372:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:2795:ALA:O	1:A:2808:PHE:N	2.45	0.47
1:A:3021:HIS:NE2	1:A:3023:ALA:HB2	2.27	0.47
1:A:3527:ARG:HG2	1:A:3553:GLU:HG3	1.96	0.47
1:A:51:LYS:HA	1:A:82:LEU:O	2.15	0.47
1:A:100:LYS:CB	1:A:113:LEU:HB3	2.43	0.47
1:A:131:LEU:HD22	1:A:157:LYS:HD2	1.97	0.47
1:A:144:TYR:HA	1:A:304:LYS:O	2.14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:497:GLN:HB3	1:A:533:LYS:HD3	1.95	0.47
1:A:586:ASN:O	1:A:589:VAL:N	2.47	0.47
1:A:797:LYS:HG3	1:A:801:MET:HE2	1.95	0.47
1:A:830:ILE:HG12	1:A:833:GLU:HB2	1.95	0.47
1:A:2492:ILE:O	1:A:2495:TRP:HB3	2.14	0.47
1:A:3253:VAL:O	1:A:3257:ASN:CA	2.62	0.47
1:A:3522:ASN:OD1	1:A:3523:SER:N	2.48	0.47
1:A:3734:GLY:O	1:A:3736:LYS:NZ	2.34	0.47
1:A:4321:LYS:HE3	1:A:4324:TYR:HE2	1.79	0.47
1:A:183:TYR:O	1:A:214:ARG:HD3	2.14	0.47
1:A:1203:SER:HA	1:A:1206:MET:HE3	1.96	0.47
1:A:1641:HIS:HA	1:A:1658:THR:HA	1.95	0.47
1:A:3419:LYS:NZ	1:A:3851:GLU:OE1	2.40	0.47
1:A:3957:GLU:OE1	1:A:3979:LYS:NZ	2.31	0.47
1:A:845:GLN:HB2	1:A:890:ILE:HB	1.96	0.47
1:A:932:PRO:HG3	1:A:1006:ARG:CZ	2.44	0.47
1:A:1373:TYR:HD1	1:A:1389:TYR:HB3	1.79	0.47
1:A:1484:VAL:HB	1:A:1503:LEU:HB3	1.96	0.47
1:A:1642:LYS:O	1:A:1657:THR:N	2.43	0.47
1:A:3919:SER:HB3	1:A:3924:LEU:HB2	1.97	0.47
1:A:153:ILE:HG22	1:A:157:LYS:NZ	2.30	0.47
1:A:411:VAL:HA	1:A:414:LEU:HG	1.96	0.47
1:A:763:LYS:HE2	1:A:2208:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:1946:TYR:C	1:A:1947:LYS:HD3	2.40	0.47
1:A:1956:SER:C	1:A:1957:ARG:HD3	2.40	0.47
1:A:2230:HIS:CD2	1:A:2270:LYS:HB2	2.49	0.47
1:A:3097:LYS:NZ	1:A:3120:GLU:OE1	2.39	0.47
1:A:3511:GLY:HA2	1:A:3536:SER:HA	1.97	0.47
1:A:3631:ILE:HD13	1:A:3650:LEU:HD22	1.95	0.47
1:A:3925:GLU:HB2	1:A:3952:ARG:NH2	2.29	0.47
1:A:3976:LEU:HG	1:A:3988:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:4054:ILE:O	1:A:4560:THR:HA	2.14	0.47
1:A:100:LYS:HE2	1:A:113:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:914:HIS:HD2	1:A:927:PRO:HD3	1.80	0.47
1:A:1083:SER:HA	1:A:1088:THR:HA	1.96	0.47
1:A:1437:PHE:CE2	1:A:1439:HIS:HB2	2.50	0.47
1:A:1556:LYS:H	1:A:1577:LYS:HZ1	1.63	0.47
1:A:2988:ILE:O	1:A:3003:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:3777:SER:HA	1:A:3793:GLU:HG2	1.96	0.47
1:A:4398:VAL:HA	1:A:4401:TYR:CD2	2.49	0.47
1:A:92:LEU:HB2	1:A:131:LEU:HB3	1.96	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:152:TYR:HB3	1:A:892:PRO:HG2	1.97	0.47
1:A:188:THR:HG23	1:A:207:ARG:HB2	1.95	0.47
1:A:343:GLN:HB3	1:A:346:ASN:ND2	2.25	0.47
1:A:367:LEU:N	1:A:368:PRO:HD2	2.30	0.47
1:A:423:ALA:HA	1:A:426:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ASP:N	2.30	0.47
1:A:697:PHE:CZ	1:A:773:ALA:HB2	2.48	0.47
1:A:926:ILE:HB	1:A:1014:TYR:HB3	1.97	0.47
1:A:934:LYS:HB3	1:A:1004:GLU:HG2	1.95	0.47
1:A:1124:ILE:HB	1:A:1133:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:1588:ASP:N	1:A:1588:ASP:OD1	2.47	0.47
1:A:1940:PHE:HD2	1:A:1972:LEU:HD12	1.80	0.47
1:A:2718:ILE:HD12	1:A:2719:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:3364:ALA:HB3	1:A:3385:THR:HB	1.97	0.47
1:A:4217:CYS:O	1:A:4221:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:147:LYS:O	1:A:147:LYS:HG3	2.15	0.47
1:A:886:ASN:HB2	1:A:900:GLN:HE22	1.80	0.47
1:A:1409:GLU:OE1	1:A:1421:SER:N	2.48	0.47
1:A:3213:ASN:O	1:A:3216:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:587:GLU:HA	1:A:590:LYS:HE2	1.97	0.47
1:A:1227:GLY:O	1:A:1231:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:1680:ALA:HB3	1:A:1703:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:1849:ALA:HB3	1:A:1873:ALA:HA	1.95	0.47
1:A:2786:GLU:HG2	1:A:2817:PRO:HB3	1.97	0.47
1:A:3073:ASN:HD21	1:A:3088:GLN:HB2	1.80	0.47
1:A:4020:SER:HB3	1:A:4043:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:4087:LYS:HA	1:A:4090:TRP:HE3	1.79	0.47
1:A:231:MET:HE2	1:A:231:MET:HA	1.97	0.47
1:A:231:MET:O	1:A:234:PRO:HD2	2.15	0.47
1:A:1668:GLU:OE2	1:A:1687:ASN:N	2.48	0.47
1:A:1952:HIS:N	1:A:1960:ILE:O	2.40	0.47
1:A:3693:THR:HA	1:A:3698:ARG:HG2	1.97	0.47
1:A:3953:ASP:OD2	1:A:4088:TYR:OH	2.24	0.47
1:A:268:LEU:HB2	1:A:269:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:3191:ALA:HA	1:A:3194:CYS:HB2	1.96	0.46
1:A:207:ARG:HH22	1:A:212:CYS:N	2.14	0.46
1:A:337:ILE:O	1:A:339:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:411:VAL:O	1:A:415:VAL:HG22	2.15	0.46
1:A:489:LEU:HD11	1:A:523:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:1476:LYS:N	1:A:1479:LEU:O	2.48	0.46
1:A:2769:PHE:CE2	1:A:2771:LEU:HB2	2.49	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3800:TYR:HB2	1:A:3811:PHE:CE2	2.50	0.46
1:A:704:LEU:HD22	1:A:711:PHE:HE2	1.80	0.46
1:A:1176:PHE:HB3	1:A:1285:VAL:HB	1.97	0.46
1:A:1289:LEU:CD2	1:A:1352:LEU:H	2.27	0.46
1:A:1719:LEU:HD12	1:A:4389:PHE:HB3	1.96	0.46
1:A:1774:TYR:HD2	1:A:1779:PHE:HA	1.80	0.46
1:A:2938:ASP:OD1	1:A:2939:GLU:N	2.48	0.46
1:A:3048:ALA:H	1:A:3076:LEU:HB3	1.80	0.46
1:A:3319:ASP:OD1	1:A:3319:ASP:N	2.47	0.46
1:A:3730:PHE:HB2	1:A:3770:ILE:HG22	1.97	0.46
1:A:3948:THR:HA	1:A:3956:ALA:O	2.15	0.46
1:A:144:TYR:CB	1:A:302:GLY:H	2.20	0.46
1:A:267:PHE:CZ	1:A:269:PRO:HD2	2.50	0.46
1:A:427:ARG:NE	1:A:427:ARG:HA	2.30	0.46
1:A:3263:PHE:HE1	1:A:3280:MET:HB2	1.80	0.46
1:A:3925:GLU:HB2	1:A:3952:ARG:CZ	2.46	0.46
1:A:56:TYR:HD1	1:A:286:LEU:HD21	1.79	0.46
1:A:469:TYR:O	1:A:472:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:533:LYS:HD3	1:A:533:LYS:O	2.15	0.46
1:A:660:ILE:HB	1:A:670:GLU:HB2	1.97	0.46
1:A:831:PHE:CD1	1:A:854:ILE:HG23	2.51	0.46
1:A:3708:PHE:CZ	1:A:3883:LEU:HD11	2.51	0.46
1:A:490:ARG:HH11	1:A:783:GLU:CD	2.23	0.46
1:A:1683:LYS:HD2	1:A:1699:LEU:O	2.15	0.46
1:A:2066:VAL:HA	1:A:2753:PRO:HA	1.97	0.46
1:A:4112:ALA:HB3	1:A:4496:ARG:HH21	1.81	0.46
1:A:341:ASN:HA	1:A:344:ARG:HE	1.80	0.46
1:A:486:TYR:CD1	1:A:526:ALA:HB2	2.51	0.46
1:A:588:GLN:HB3	1:A:633:PHE:CD1	2.50	0.46
1:A:896:ARG:NH2	1:A:946:SER:O	2.49	0.46
1:A:941:THR:HG23	1:A:998:ASP:OD1	2.16	0.46
1:A:2726:LEU:HG	1:A:2728:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:3099:ASN:OD1	1:A:3101:ASN:ND2	2.49	0.46
1:A:3594:TRP:CZ2	1:A:3805:ASP:HB2	2.50	0.46
1:A:140:GLN:HB3	1:A:142:PHE:HE2	1.80	0.46
1:A:235:LEU:O	1:A:239:ILE:HG12	2.15	0.46
1:A:397:TRP:CZ2	1:A:401:VAL:HG11	2.51	0.46
1:A:1115:LYS:HG3	1:A:1116:GLU:H	1.81	0.46
1:A:3547:LYS:HE3	1:A:3565:HIS:CE1	2.51	0.46
1:A:3017:PHE:HB3	1:A:3039:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:1304:GLY:HA3	1:A:1344:LYS:NZ	2.31	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1500:THR:N	1:A:1521:ARG:O	2.47	0.46
1:A:3725:VAL:HG22	1:A:3730:PHE:CD1	2.51	0.46
1:A:3790:LYS:HB2	1:A:3821:THR:HB	1.97	0.46
1:A:3910:GLU:N	1:A:3910:GLU:OE1	2.48	0.46
1:A:3951:HIS:CG	1:A:3952:ARG:H	2.33	0.46
1:A:399:LYS:HE3	1:A:400:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:449:VAL:HB	1:A:495:MET:HE2	1.97	0.45
1:A:928:SER:O	1:A:930:LYS:NZ	2.33	0.45
1:A:2420:LEU:O	1:A:2424:ILE:HG12	2.15	0.45
1:A:2769:PHE:CD1	1:A:2799:SER:HB3	2.51	0.45
1:A:3780:ALA:CB	1:A:3790:LYS:HG2	2.46	0.45
1:A:3946:LYS:HZ1	1:A:3957:GLU:C	2.24	0.45
1:A:4367:LEU:HD11	1:A:4422:HIS:CE1	2.51	0.45
1:A:1155:THR:HG22	1:A:1160:THR:HA	1.97	0.45
1:A:3647:GLN:HG3	1:A:3662:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:83:GLU:HB2	1:A:91:ILE:HB	1.98	0.45
1:A:422:SER:OG	1:A:425:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:471:MET:SD	1:A:506:LEU:HG	2.56	0.45
1:A:711:PHE:HB2	1:A:712:PRO:HD3	1.99	0.45
1:A:906:PHE:C	1:A:934:LYS:HZ2	2.20	0.45
1:A:1625:GLU:H	1:A:1625:GLU:CD	2.24	0.45
1:A:3153:TRP:CD1	1:A:3159:LYS:HB2	2.51	0.45
1:A:3901:SER:OG	1:A:3912:VAL:HB	2.16	0.45
1:A:399:LYS:HE3	1:A:400:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:592:PHE:HB2	1:A:634:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:1501:TYR:CE2	1:A:1503:LEU:HB2	2.52	0.45
1:A:1572:SER:HB2	1:A:1587:MET:SD	2.56	0.45
1:A:1631:LEU:HD13	1:A:1640:ALA:HA	1.98	0.45
1:A:2860:LEU:HB3	1:A:2867:LEU:HB3	1.97	0.45
1:A:2905:ASP:OD1	1:A:2907:ARG:NH1	2.47	0.45
1:A:3100:GLN:HB3	1:A:3102:PHE:HE2	1.81	0.45
1:A:3202:LYS:O	1:A:3205:ASP:HB2	2.15	0.45
1:A:3977:ASN:C	1:A:3979:LYS:HZ3	2.23	0.45
1:A:4089:HIS:HE1	1:A:4095:LEU:HB2	1.81	0.45
1:A:658:ASN:O	1:A:671:SER:HA	2.16	0.45
1:A:1049:MET:HG3	1:A:1064:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:1570:LEU:HD12	1:A:1570:LEU:O	2.17	0.45
1:A:2619:VAL:O	1:A:2622:THR:OG1	2.30	0.45
1:A:4010:GLY:HA3	1:A:4025:TYR:CZ	2.52	0.45
1:A:1289:LEU:HD22	1:A:1352:LEU:N	2.31	0.45
1:A:3291:ARG:HE	1:A:3318:PRO:HB2	1.80	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3520:TYR:CE2	1:A:3522:ASN:HB2	2.51	0.45
1:A:4068:THR:O	1:A:4071:LYS:HG3	2.16	0.45
1:A:4280:ALA:HA	1:A:4283:VAL:HG12	1.97	0.45
1:A:4394:VAL:O	1:A:4398:VAL:HG22	2.17	0.45
1:A:689:GLU:O	1:A:777:LEU:HD12	2.16	0.45
1:A:887:MET:HE2	1:A:899:VAL:HG13	1.99	0.45
1:A:891:ILE:HG22	1:A:894:PHE:HD2	1.81	0.45
1:A:1367:TYR:CZ	1:A:1369:TRP:HB2	2.51	0.45
1:A:1506:GLN:HB2	1:A:1515:ASN:HB2	1.99	0.45
1:A:1603:GLN:NE2	1:A:1611:PHE:O	2.49	0.45
1:A:3283:PHE:H	1:A:3292:VAL:HG21	1.82	0.45
1:A:3744:LEU:HB3	1:A:3763:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:4247:GLN:O	1:A:4251:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:4283:VAL:O	1:A:4287:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:119:SER:HA	1:A:122:PHE:HB3	1.99	0.45
1:A:390:CYS:O	1:A:394:ILE:HG12	2.16	0.45
1:A:710:PHE:CG	1:A:761:LEU:HD22	2.52	0.45
1:A:1218:GLN:HE22	1:A:4526:GLN:HG2	1.82	0.45
1:A:2119:PRO:HB2	1:A:2371:LYS:HE3	1.99	0.45
1:A:2153:GLU:HG2	1:A:2331:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:2929:TRP:HZ3	1:A:2942:HIS:HB2	1.81	0.45
1:A:3820:LEU:HB2	1:A:3862:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:3946:LYS:HD2	1:A:3958:TYR:O	2.16	0.45
1:A:4046:ARG:NH2	1:A:4053:GLN:OE1	2.49	0.45
1:A:4459:ASP:OD1	1:A:4459:ASP:N	2.50	0.45
1:A:575:ASN:ND2	1:A:579:GLN:HE22	2.15	0.45
1:A:1490:PHE:C	1:A:1491:ARG:HD3	2.42	0.45
1:A:1830:ALA:HB2	1:A:1835:GLU:HG3	1.99	0.45
1:A:2700:ASP:C	1:A:2705:ARG:HH12	2.25	0.45
1:A:2966:LYS:HG3	1:A:2967:HIS:CD2	2.51	0.45
1:A:363:VAL:HA	1:A:366:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:1217:PRO:HG3	1:A:4531:PHE:CE2	2.52	0.45
1:A:2145:LEU:HD23	1:A:2342:HIS:CE1	2.52	0.45
1:A:3060:PHE:HB2	1:A:3064:LEU:HB2	1.98	0.45
1:A:4457:ASP:OD1	1:A:4457:ASP:N	2.46	0.45
1:A:419:PRO:HB2	1:A:420:GLU:OE1	2.17	0.44
1:A:495:MET:SD	1:A:495:MET:N	2.91	0.44
1:A:1101:ILE:O	1:A:1103:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:2764:ILE:N	1:A:2771:LEU:O	2.45	0.44
1:A:2799:SER:O	1:A:2805:ASN:ND2	2.49	0.44
1:A:2884:ASP:HB2	1:A:2911:LYS:HD3	1.99	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2948:PHE:HD1	1:A:2957:PHE:HD1	1.65	0.44
1:A:3258:VAL:HG13	1:A:3285:ILE:HG22	1.99	0.44
1:A:3291:ARG:HB3	1:A:3320:PHE:HD1	1.82	0.44
1:A:3562:LEU:HD13	1:A:3588:THR:HG22	1.99	0.44
1:A:3918:SER:CA	1:A:3925:GLU:HG2	2.36	0.44
1:A:4036:LEU:HB3	1:A:4062:ALA:HB2	1.99	0.44
1:A:73:ALA:HB3	1:A:102:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:141:VAL:O	1:A:307:GLY:HA2	2.18	0.44
1:A:253:ARG:HB2	1:A:255:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:1599:ARG:HD2	1:A:1600:SER:N	2.31	0.44
1:A:2969:ARG:HB2	1:A:2993:ASP:HB2	2.00	0.44
1:A:4262:LEU:O	1:A:4266:ILE:HG12	2.17	0.44
1:A:4341:ILE:HB	1:A:4342:PRO:HD3	1.98	0.44
1:A:120:GLU:O	1:A:123:ALA:HB3	2.17	0.44
1:A:576:LYS:O	1:A:580:ILE:HG12	2.17	0.44
1:A:902:ASN:ND2	1:A:943:HIS:HD2	2.15	0.44
1:A:902:ASN:HB2	1:A:941:THR:O	2.16	0.44
1:A:3343:PHE:CE2	1:A:3345:SER:HB3	2.53	0.44
1:A:3682:LYS:HD2	1:A:3687:PHE:HD1	1.81	0.44
1:A:4474:GLN:O	1:A:4478:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:4540:LYS:HE2	1:A:4554:LEU:HD23	2.00	0.44
1:A:486:TYR:CE1	1:A:526:ALA:HB2	2.52	0.44
1:A:1010:GLU:O	1:A:1042:ALA:N	2.50	0.44
1:A:3685:TRP:CG	1:A:3695:SER:HA	2.53	0.44
1:A:106:ASN:N	1:A:110:LYS:O	2.40	0.44
1:A:136:PRO:C	1:A:138:GLY:H	2.26	0.44
1:A:1480:PHE:HE2	1:A:1509:PRO:HG3	1.82	0.44
1:A:1906:THR:OG1	1:A:1934:LYS:NZ	2.37	0.44
1:A:2869:LEU:HA	1:A:2888:LYS:O	2.18	0.44
1:A:3958:TYR:CD2	1:A:3976:LEU:HB3	2.51	0.44
1:A:209:LEU:HD11	1:A:263:GLU:OE1	2.18	0.44
1:A:692:LEU:HD13	1:A:775:ALA:HB2	1.99	0.44
1:A:1123:VAL:HG13	1:A:1134:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:3170:ASP:HB2	1:A:3344:LYS:HB3	1.99	0.44
1:A:3185:SER:HB3	1:A:3328:HIS:HB3	2.00	0.44
1:A:3497:LYS:HA	1:A:3513:ILE:O	2.16	0.44
1:A:4116:TYR:CD1	1:A:4488:ILE:HG22	2.53	0.44
1:A:593:VAL:O	1:A:597:ILE:HG12	2.18	0.44
1:A:600:ILE:HA	1:A:608:ILE:HD11	2.00	0.44
1:A:2025:LYS:HE3	1:A:2032:GLU:HG2	1.99	0.44
1:A:2067:HIS:HB3	1:A:2752:VAL:O	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2624:LEU:HD12	1:A:2648:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:2795:ALA:N	1:A:2808:PHE:O	2.41	0.44
1:A:3067:LYS:HB2	1:A:3092:ARG:HH12	1.83	0.44
1:A:3547:LYS:HE3	1:A:3565:HIS:NE2	2.32	0.44
1:A:341:ASN:OD1	1:A:344:ARG:HD2	2.17	0.44
1:A:375:SER:HB3	1:A:376:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:1172:GLU:O	1:A:1173:LYS:HE2	2.18	0.44
1:A:3115:VAL:HG12	1:A:3117:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:4006:VAL:HG12	1:A:4026:TYR:HE1	1.82	0.44
1:A:52:TYR:HB2	1:A:82:LEU:HB3	1.99	0.44
1:A:135:ILE:O	1:A:135:ILE:HG23	2.18	0.44
1:A:1134:ARG:HB2	1:A:1153:SER:H	1.82	0.44
1:A:1390:HIS:NE2	1:A:1392:LYS:HB2	2.33	0.44
1:A:1592:SER:OG	1:A:1593:LYS:N	2.51	0.44
1:A:1702:LYS:O	1:A:1708:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:2536:LEU:HD22	1:A:2636:LEU:HB3	2.00	0.44
1:A:2903:GLN:HB3	1:A:2930:LYS:HG3	2.00	0.44
1:A:3479:HIS:ND1	1:A:3495:SER:O	2.49	0.44
1:A:89:SER:HB2	1:A:299:PHE:CD1	2.53	0.43
1:A:207:ARG:NH2	1:A:211:GLN:HB2	2.33	0.43
1:A:1691:ARG:NE	1:A:4392:SER:HG	2.11	0.43
1:A:1693:HIS:HB3	1:A:1718:ILE:HD13	2.00	0.43
1:A:3085:ALA:N	1:A:3104:ALA:O	2.37	0.43
1:A:3712:LYS:HB2	1:A:3878:PRO:CB	2.46	0.43
1:A:3972:GLY:C	1:A:3973:LYS:HD3	2.43	0.43
1:A:4126:ILE:HA	1:A:4129:ARG:HG2	1.99	0.43
1:A:161:ILE:O	1:A:165:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:486:TYR:OH	1:A:774:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:1123:VAL:HG13	1:A:1134:ARG:HH12	1.83	0.43
1:A:1968:VAL:HG13	1:A:1981:TRP:CD1	2.53	0.43
1:A:2192:HIS:HB2	1:A:2294:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:2846:PHE:N	1:A:2849:ALA:O	2.51	0.43
1:A:4087:LYS:HA	1:A:4090:TRP:CE3	2.54	0.43
1:A:4302:LEU:O	1:A:4306:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:4532:LEU:HA	1:A:4535:ILE:HG12	2.00	0.43
1:A:750:MET:HE3	1:A:754:ILE:CG1	2.48	0.43
1:A:762:ILE:HG21	1:A:2208:LYS:HB3	2.00	0.43
1:A:774:ARG:HH11	1:A:776:TYR:HB3	1.83	0.43
1:A:795:LEU:O	1:A:798:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:1205:HIS:CE1	1:A:1262:ASN:HD21	2.36	0.43
1:A:500:GLU:OE2	1:A:534:MET:HB3	2.17	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:869:MET:HB3	1:A:917:LEU:HB3	2.00	0.43
1:A:1683:LYS:NZ	1:A:1684:LEU:O	2.45	0.43
1:A:1775:SER:N	1:A:1778:LYS:O	2.40	0.43
1:A:2116:GLY:HA2	1:A:2374:ILE:HG21	1.99	0.43
1:A:2968:LEU:C	1:A:2969:ARG:HD3	2.42	0.43
1:A:3564:GLU:OE2	1:A:3566:SER:HB2	2.19	0.43
1:A:3685:TRP:HB3	1:A:3694:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:4145:LYS:HE3	1:A:4463:LYS:HG3	2.01	0.43
1:A:57:GLU:N	1:A:57:GLU:OE1	2.51	0.43
1:A:123:ALA:HA	1:A:126:MET:SD	2.58	0.43
1:A:131:LEU:HD11	1:A:143:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:565:LEU:HD23	1:A:569:PRO:HB3	2.01	0.43
1:A:1697:PHE:HD1	1:A:1714:TYR:HB2	1.83	0.43
1:A:1940:PHE:CD2	1:A:1972:LEU:HD12	2.52	0.43
1:A:2825:LYS:HA	1:A:2842:GLU:HA	2.00	0.43
1:A:3067:LYS:N	1:A:3094:ASN:OD1	2.47	0.43
1:A:3550:PHE:HB2	1:A:3563:TRP:HA	1.99	0.43
1:A:4031:SER:OG	1:A:4033:ASP:OD1	2.37	0.43
1:A:1554:ILE:O	1:A:1577:LYS:HE2	2.18	0.43
1:A:1756:SER:HB2	1:A:1767:SER:HB3	2.00	0.43
1:A:2984:SER:HB3	1:A:3008:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:209:LEU:HD12	1:A:241:SER:HB2	2.00	0.43
1:A:493:GLY:HA2	1:A:534:MET:HE3	1.99	0.43
1:A:889:ILE:O	1:A:890:ILE:HD13	2.18	0.43
1:A:912:GLU:HB3	1:A:927:PRO:HG2	1.99	0.43
1:A:1171:GLU:HA	1:A:1293:SER:HB2	2.01	0.43
1:A:1476:LYS:O	1:A:1478:HIS:N	2.51	0.43
1:A:1573:ASP:OD2	1:A:1575:ASN:ND2	2.51	0.43
1:A:2375:GLN:NE2	1:A:2376:LYS:HG3	2.33	0.43
1:A:2946:ILE:HA	1:A:2959:LEU:HD13	2.01	0.43
1:A:3632:ARG:NH1	1:A:3633:TRP:O	2.52	0.43
1:A:3903:LYS:HB3	1:A:3905:LYS:NZ	2.33	0.43
1:A:3984:THR:HB	1:A:4004:PRO:HG2	2.00	0.43
1:A:4119:ALA:O	1:A:4123:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:531:LEU:HD23	1:A:534:MET:SD	2.58	0.43
1:A:1586:LYS:NZ	1:A:1588:ASP:HB3	2.34	0.43
1:A:1802:LYS:NZ	1:A:1807:ASP:OD2	2.52	0.43
1:A:1889:SER:O	1:A:1916:LYS:N	2.44	0.43
1:A:2798:GLU:OE2	1:A:2798:GLU:N	2.38	0.43
1:A:1914:ASN:HD21	1:A:1916:LYS:HE2	1.82	0.43
1:A:1933:LEU:HD11	1:A:1940:PHE:HZ	1.83	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1986:GLN:HG3	1:A:1991:GLU:HB2	2.01	0.43
1:A:2036:ILE:HG23	1:A:2800:LYS:HE3	2.00	0.43
1:A:2795:ALA:C	1:A:2796:LYS:HD3	2.44	0.43
1:A:342:ILE:H	1:A:342:ILE:HD12	1.83	0.43
1:A:874:VAL:HA	1:A:876:LYS:HZ2	1.84	0.43
1:A:1431:LEU:HD11	1:A:1457:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:1877:SER:OG	1:A:1878:ALA:N	2.52	0.43
1:A:3132:ILE:N	1:A:3147:LEU:O	2.46	0.43
1:A:46:PHE:HE1	1:A:87:LEU:HA	1.83	0.42
1:A:369:GLN:O	1:A:373:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:395:LEU:HB3	1:A:432:MET:CE	2.48	0.42
1:A:1197:LEU:HB3	1:A:1200:TYR:HB2	2.01	0.42
1:A:1426:LEU:HB2	1:A:1433:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:1595:ASN:ND2	1:A:1618:SER:OG	2.43	0.42
1:A:1907:ILE:HB	1:A:1933:LEU:HB3	1.99	0.42
1:A:2186:LYS:HE3	1:A:2302:GLY:HA3	2.00	0.42
1:A:2943:GLU:HB2	1:A:2962:LYS:HB3	2.01	0.42
1:A:3630:LYS:NZ	1:A:3653:ASP:HB3	2.34	0.42
1:A:3810:PHE:HD1	1:A:3872:PRO:HA	1.84	0.42
1:A:4070:LEU:O	1:A:4074:VAL:HG23	2.18	0.42
1:A:1993:SER:HB3	1:A:2012:ARG:HH21	1.85	0.42
1:A:2370:LEU:O	1:A:2374:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:2459:LEU:HB2	1:A:2460:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:2859:SER:HA	1:A:2868:GLU:HA	2.00	0.42
1:A:2922:THR:OG1	1:A:2945:GLN:NE2	2.51	0.42
1:A:2962:LYS:NZ	1:A:2964:ASN:HB3	2.34	0.42
1:A:3425:VAL:O	1:A:3443:GLU:HA	2.19	0.42
1:A:3584:THR:OG1	1:A:3602:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:3674:ASN:HA	1:A:3685:TRP:CZ3	2.54	0.42
1:A:41:LYS:O	1:A:44:THR:OG1	2.29	0.42
1:A:49:LEU:HB3	1:A:294:ILE:O	2.19	0.42
1:A:2523:MET:HE2	1:A:2523:MET:HB3	1.89	0.42
1:A:3291:ARG:HB3	1:A:3320:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:329:LEU:HD11	1:A:333:LYS:HE2	2.02	0.42
1:A:2250:GLN:O	1:A:2253:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:2463:ALA:HB2	1:A:2716:ILE:HG12	2.01	0.42
1:A:3067:LYS:HB2	1:A:3094:ASN:HA	2.02	0.42
1:A:3532:LEU:HB2	1:A:3548:GLU:CB	2.49	0.42
1:A:3544:LEU:HD22	1:A:3569:ASN:HB2	2.01	0.42
1:A:3673:LYS:NZ	1:A:3694:THR:HA	2.34	0.42
1:A:3955:SER:O	1:A:3978:ILE:HD12	2.20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4058:TRP:CE2	1:A:4557:GLY:HA2	2.55	0.42
1:A:4441:GLU:O	1:A:4444:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:240:SER:O	1:A:265:HIS:ND1	2.51	0.42
1:A:379:LEU:O	1:A:383:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:665:ASN:HD21	1:A:698:GLU:HA	1.85	0.42
1:A:1122:GLY:N	1:A:1135:SER:O	2.51	0.42
1:A:1595:ASN:ND2	1:A:1619:LEU:O	2.52	0.42
1:A:4183:HIS:CE1	1:A:4304:GLN:HG2	2.54	0.42
1:A:61:SER:HB2	1:A:71:ARG:HD2	2.00	0.42
1:A:352:VAL:O	1:A:355:LEU:HB3	2.20	0.42
1:A:575:ASN:HA	1:A:618:ALA:HB1	2.02	0.42
1:A:655:ILE:HD13	1:A:675:THR:HB	2.02	0.42
1:A:916:ALA:HB3	1:A:923:LYS:HE2	2.01	0.42
1:A:1121:LYS:HA	1:A:1136:GLU:HA	2.01	0.42
1:A:1373:TYR:CD1	1:A:1389:TYR:HB3	2.54	0.42
1:A:4127:ASP:OD2	1:A:4478:LYS:NZ	2.38	0.42
1:A:86:GLN:HB2	1:A:89:SER:OG	2.20	0.42
1:A:106:ASN:HB2	1:A:110:LYS:HB2	2.01	0.42
1:A:326:LEU:HD11	1:A:370:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:993:TYR:N	1:A:994:PRO:HD2	2.34	0.42
1:A:1668:GLU:OE1	1:A:1668:GLU:N	2.52	0.42
1:A:2005:ILE:CG2	1:A:2060:TYR:HB3	2.50	0.42
1:A:2194:LEU:O	1:A:2198:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:2969:ARG:NH1	1:A:2995:GLN:OE1	2.39	0.42
1:A:3618:GLN:NE2	1:A:3635:ASN:HB3	2.35	0.42
1:A:3680:TYR:HB3	1:A:3682:LYS:HZ3	1.84	0.42
1:A:4071:LYS:HB3	1:A:4521:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:209:LEU:HG	1:A:242:SER:HA	2.01	0.42
1:A:673:LEU:HG	1:A:690:ILE:HB	2.02	0.42
1:A:1855:THR:O	1:A:1867:ARG:NH2	2.48	0.42
1:A:1999:TYR:HB2	1:A:2059:LYS:HE2	2.01	0.42
1:A:2000:ASN:HA	1:A:2005:ILE:HG13	2.01	0.42
1:A:2055:VAL:HB	1:A:2763:LYS:HG3	2.02	0.42
1:A:2145:LEU:HD11	1:A:2338:ARG:HD2	2.02	0.42
1:A:2763:LYS:CG	1:A:2765:GLN:HE22	2.32	0.42
1:A:3710:TYR:HE2	1:A:3712:LYS:HB3	1.83	0.42
1:A:3803:PRO:HB2	1:A:3806:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:324:ALA:HA	1:A:327:LYS:HG2	2.02	0.42
1:A:1014:TYR:OH	1:A:1037:THR:O	2.30	0.42
1:A:1766:PHE:HB3	1:A:1786:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:2418:LYS:HE3	1:A:2418:LYS:HB3	1.81	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2759:TYR:CD2	1:A:2761:ILE:HG13	2.54	0.42
1:A:2808:PHE:CZ	1:A:2810:ALA:HB2	2.55	0.42
1:A:4024:PHE:O	1:A:4038:ILE:N	2.53	0.42
1:A:4186:VAL:O	1:A:4190:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:176:VAL:HB	1:A:189:HIS:ND1	2.35	0.42
1:A:331:GLU:O	1:A:335:LEU:N	2.49	0.42
1:A:1169:TYR:OH	1:A:1293:SER:OG	2.24	0.42
1:A:1613:SER:HA	1:A:1630:ILE:HA	2.01	0.42
1:A:1977:GLN:OE1	1:A:2000:ASN:ND2	2.53	0.42
1:A:2543:TYR:CE2	1:A:2610:ALA:HB2	2.54	0.42
1:A:2572:ASP:OD1	1:A:2572:ASP:N	2.50	0.42
1:A:2771:LEU:HD12	1:A:2796:LYS:O	2.20	0.42
1:A:3451:LYS:HE2	1:A:3451:LYS:HB2	1.87	0.42
1:A:3585:SER:HB3	1:A:3601:GLN:HG3	2.01	0.42
1:A:3824:GLN:HE21	1:A:3856:ILE:HG23	1.85	0.42
1:A:4013:MET:HG3	1:A:4022:TRP:CD1	2.55	0.42
1:A:174:LYS:HD2	1:A:189:HIS:ND1	2.35	0.41
1:A:408:ILE:HA	1:A:411:VAL:HG12	2.02	0.41
1:A:822:LYS:HA	1:A:861:GLY:HA3	2.01	0.41
1:A:1707:GLU:HG3	1:A:1731:VAL:O	2.20	0.41
1:A:3176:GLN:O	1:A:3338:THR:OG1	2.35	0.41
1:A:3462:TYR:HE1	1:A:3477:VAL:HG23	1.85	0.41
1:A:709:GLY:C	1:A:712:PRO:HD2	2.44	0.41
1:A:924:PHE:O	1:A:1015:SER:HA	2.20	0.41
1:A:1625:GLU:OE1	1:A:1625:GLU:N	2.50	0.41
1:A:2040:LEU:HB3	1:A:2042:MET:HE3	2.02	0.41
1:A:3457:SER:O	1:A:3458:MET:HE2	2.20	0.41
1:A:4006:VAL:HG12	1:A:4026:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:4484:THR:O	1:A:4488:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:4555:ALA:O	1:A:4557:GLY:N	2.53	0.41
1:A:509:SER:HA	1:A:512:LYS:HG2	2.02	0.41
1:A:905:PHE:HA	1:A:937:SER:O	2.21	0.41
1:A:1357:ASP:HA	1:A:1374:SER:HA	2.02	0.41
1:A:1418:PHE:CZ	1:A:1420:LEU:HB2	2.55	0.41
1:A:1634:ASP:OD2	1:A:1635:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:1833:ASN:OD1	1:A:1834:ASN:N	2.53	0.41
1:A:2493:ILE:HG13	1:A:2689:PRO:HG3	2.01	0.41
1:A:2806:PHE:HA	1:A:2831:SER:O	2.20	0.41
1:A:2892:LYS:NZ	1:A:2894:ASN:HB2	2.35	0.41
1:A:3381:LEU:HD13	1:A:3401:LEU:HD13	2.01	0.41
1:A:3578:PHE:CE2	1:A:3580:ASN:HB3	2.55	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3668:HIS:O	1:A:3670:ARG:HG2	2.21	0.41
1:A:394:ILE:O	1:A:398:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:443:TYR:CE1	1:A:783:GLU:HB2	2.55	0.41
1:A:748:GLN:O	1:A:752:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:2055:VAL:HB	1:A:2763:LYS:CG	2.50	0.41
1:A:2362:VAL:HG13	1:A:2366:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:2884:ASP:HA	1:A:2910:ILE:O	2.20	0.41
1:A:2971:ASN:HB3	1:A:2991:GLN:HB2	2.01	0.41
1:A:3019:GLY:HA3	1:A:3037:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:3088:GLN:OE1	1:A:3101:ASN:HA	2.20	0.41
1:A:3441:LYS:HB3	1:A:3459:GLU:HB2	2.01	0.41
1:A:3723:VAL:HG21	1:A:3811:PHE:CZ	2.50	0.41
1:A:79:LYS:HE3	1:A:79:LYS:HB3	1.92	0.41
1:A:207:ARG:HD3	1:A:208:ASP:O	2.21	0.41
1:A:332:LEU:HD21	1:A:347:LEU:CD1	2.48	0.41
1:A:1093:THR:OG1	1:A:1107:MET:SD	2.75	0.41
1:A:1167:TRP:HD1	1:A:1176:PHE:HB2	1.86	0.41
1:A:1251:LEU:O	1:A:1255:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:1665:LEU:HD12	1:A:1689:ARG:O	2.20	0.41
1:A:2006:GLY:HA3	1:A:2059:LYS:HD3	2.03	0.41
1:A:2862:THR:OG1	1:A:2863:GLU:N	2.53	0.41
1:A:2918:HIS:NE2	1:A:2920:ALA:HB2	2.35	0.41
1:A:3776:THR:O	1:A:3793:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:3954:PHE:CD2	1:A:3978:ILE:HD11	2.56	0.41
1:A:3970:TRP:HE3	1:A:3992:LYS:HD3	1.85	0.41
1:A:216:LYS:O	1:A:838:LEU:HD11	2.21	0.41
1:A:838:LEU:HB2	1:A:846:LEU:CD1	2.44	0.41
1:A:960:ARG:HA	1:A:960:ARG:HD2	1.87	0.41
1:A:1000:ARG:HG3	1:A:1002:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:1693:HIS:HB3	1:A:1718:ILE:CD1	2.51	0.41
1:A:1742:MET:O	1:A:1743:MET:HE2	2.20	0.41
1:A:2093:GLU:HB3	1:A:2097:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:3772:LYS:HG3	1:A:3798:THR:O	2.20	0.41
1:A:3921:VAL:HB	1:A:3924:LEU:HG	2.01	0.41
1:A:4116:TYR:O	1:A:4120:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:115:LYS:HZ1	1:A:119:SER:CB	2.34	0.41
1:A:319:PRO:HD2	1:A:320:LYS:NZ	2.35	0.41
1:A:349:ASN:HA	1:A:352:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:821:SER:OG	1:A:822:LYS:N	2.53	0.41
1:A:1726:ILE:N	1:A:1741:ASP:O	2.54	0.41
1:A:2439:THR:O	1:A:2443:ILE:HG12	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2528:ILE:HG21	1:A:2665:PHE:HB3	2.02	0.41
1:A:3025:LEU:HD22	1:A:3056:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:3085:ALA:HB3	1:A:3104:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:758:VAL:O	1:A:762:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:1066:ILE:N	1:A:1071:VAL:O	2.41	0.41
1:A:1186:THR:HB	1:A:1275:GLU:HA	2.02	0.41
1:A:1414:HIS:C	1:A:1416:ASN:H	2.28	0.41
1:A:2067:HIS:HB2	1:A:2754:THR:HG23	2.03	0.41
1:A:2826:GLU:N	1:A:2841:SER:O	2.53	0.41
1:A:3519:THR:HG23	1:A:3528:SER:OG	2.20	0.41
1:A:4443:PHE:CD1	1:A:4446:ARG:HD2	2.55	0.41
1:A:1287:TYR:HD1	1:A:1356:LEU:HD11	1.85	0.41
1:A:1984:LYS:NZ	1:A:1995:ASP:OD1	2.38	0.41
1:A:2199:ALA:O	1:A:2202:ILE:HB	2.21	0.41
1:A:2205:ILE:O	1:A:2209:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:2208:LYS:HA	1:A:2208:LYS:HD3	1.92	0.41
1:A:2417:ASN:O	1:A:2420:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:2584:GLY:HA3	1:A:2602:VAL:O	2.21	0.41
1:A:2640:LYS:HE2	1:A:2640:LYS:HB3	1.88	0.41
1:A:3111:MET:CE	1:A:3179:LYS:HB2	2.45	0.41
1:A:3223:TYR:CE1	1:A:3306:VAL:HA	2.52	0.41
1:A:3429:THR:HB	1:A:3440:PHE:CZ	2.56	0.41
1:A:3655:GLU:HG3	1:A:3656:LYS:HG3	2.02	0.41
1:A:3680:TYR:HB3	1:A:3682:LYS:NZ	2.36	0.41
1:A:3810:PHE:CD1	1:A:3872:PRO:HA	2.56	0.41
1:A:3815:VAL:O	1:A:3866:SER:HA	2.21	0.41
1:A:3979:LYS:HE2	1:A:3979:LYS:HB2	1.78	0.41
1:A:4064:SER:HB2	1:A:4529:HIS:CE1	2.56	0.41
1:A:4067:LEU:HD13	1:A:4525:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:4488:ILE:HA	1:A:4491:TYR:CD1	2.56	0.41
1:A:185:ASN:OD1	1:A:213:ASP:HB2	2.21	0.41
1:A:914:HIS:CD2	1:A:927:PRO:HG3	2.56	0.41
1:A:1370:SER:HB3	1:A:1392:LYS:HE3	2.03	0.41
1:A:1660:LEU:HD21	1:A:1667:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:1765:ASP:HA	1:A:1787:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:3100:GLN:HB3	1:A:3102:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:3925:GLU:N	1:A:3951:HIS:HE1	2.19	0.41
1:A:1522:PHE:N	1:A:1529:GLY:O	2.34	0.40
1:A:2154:ASN:O	1:A:2158:ILE:HG13	2.21	0.40
1:A:2447:THR:O	1:A:2450:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:2791:ALA:O	1:A:2812:ALA:N	2.54	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3650:LEU:HD12	1:A:3659:LEU:HD11	2.02	0.40
1:A:1751:PHE:HB3	1:A:1753:HIS:CD2	2.56	0.40
1:A:1751:PHE:HB3	1:A:1753:HIS:NE2	2.36	0.40
1:A:2823:ALA:O	1:A:2825:LYS:NZ	2.46	0.40
1:A:3459:GLU:HG3	1:A:3478:ASP:OD1	2.20	0.40
1:A:3608:SER:OG	1:A:3609:SER:N	2.52	0.40
1:A:4116:TYR:CE1	1:A:4488:ILE:HG22	2.57	0.40
1:A:97:CYS:HB3	1:A:122:PHE:HE2	1.86	0.40
1:A:757:SER:O	1:A:760:LYS:HG2	2.22	0.40
1:A:1025:GLU:O	1:A:1028:ALA:N	2.48	0.40
1:A:2046:VAL:HG23	1:A:2047:GLU:HG3	2.03	0.40
1:A:2103:ASN:HB3	1:A:2105:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:2794:THR:HA	1:A:2809:GLN:HA	2.03	0.40
1:A:2825:LYS:HB2	1:A:2842:GLU:HG3	2.03	0.40
1:A:2912:THR:HG1	1:A:2921:TRP:NE1	2.19	0.40
1:A:3507:ARG:HB3	1:A:3539:ASP:CG	2.47	0.40
1:A:3592:SER:OG	1:A:3595:GLN:HB3	2.22	0.40
1:A:4204:PHE:HE2	1:A:4216:LEU:HD21	1.86	0.40
1:A:4228:LEU:HD13	1:A:4281:GLN:HA	2.04	0.40
1:A:64:VAL:HG12	1:A:66:GLY:N	2.35	0.40
1:A:67:THR:O	1:A:70:SER:OG	2.26	0.40
1:A:325:VAL:HG22	1:A:351:LEU:CD1	2.52	0.40
1:A:427:ARG:HH11	1:A:427:ARG:HG2	1.86	0.40
1:A:1087:LYS:HG3	1:A:1113:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:1418:PHE:O	1:A:1440:VAL:HG13	2.22	0.40
1:A:2531:GLU:HG3	1:A:2534:ARG:HH21	1.87	0.40
1:A:3567:THR:HA	1:A:3583:HIS:CG	2.56	0.40
1:A:3587:ALA:HB1	1:A:3600:VAL:HG13	2.02	0.40
1:A:4552:MET:C	1:A:4552:MET:SD	3.05	0.40
1:A:329:LEU:HD12	1:A:332:LEU:HB2	2.03	0.40
1:A:677:LEU:HB3	1:A:687:LEU:CD2	2.49	0.40
1:A:1020:TYR:HB2	1:A:1033:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:2197:ALA:O	1:A:2200:ASN:HB3	2.22	0.40
1:A:3233:TYR:HD2	1:A:3235:ALA:HB2	1.86	0.40
1:A:3965:GLU:O	1:A:3969:GLU:CB	2.59	0.40
1:A:3986:LEU:HD12	1:A:4002:ALA:O	2.22	0.40
1:A:4101:SER:O	1:A:4105:ARG:HG2	2.21	0.40
1:A:4297:ARG:NH1	1:A:4300:GLN:OE1	2.54	0.40
1:A:4339:ASP:O	1:A:4342:PRO:HD2	2.22	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	4524/4563 (99%)	4297 (95%)	219 (5%)	8 (0%)	43 78

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	137	GLU
1	A	1477	GLN
1	A	3828	PRO
1	A	375	SER
1	A	1200	TYR
1	A	2801	LEU
1	A	3626	THR
1	A	2817	PRO

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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	4051/4080 (99%)	4050 (100%)	1 (0%)	100 100

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	76	ILE

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (46) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	264	GLN
1	A	387	GLN
1	A	393	HIS
1	A	402	HIS
1	A	450	ASN
1	A	579	GLN
1	A	664	ASN
1	A	870	GLN
1	A	943	HIS
1	A	1209	ASN
1	A	1218	GLN
1	A	1532	GLN
1	A	1595	ASN
1	A	1740	ASN
1	A	1772	ASN
1	A	1838	HIS
1	A	2200	ASN
1	A	2250	GLN
1	A	2272	HIS
1	A	2279	GLN
1	A	2382	GLN
1	A	2417	ASN
1	A	2485	GLN
1	A	2630	GLN
1	A	2632	ASN
1	A	2727	ASN
1	A	2737	HIS
1	A	2765	GLN
1	A	3035	ASN
1	A	3099	ASN
1	A	3101	ASN
1	A	3109	ASN
1	A	3127	ASN
1	A	3308	HIS
1	A	3432	GLN
1	A	3442	GLN
1	A	3447	ASN
1	A	3533	GLN
1	A	3623	ASN
1	A	3645	GLN
1	A	3802	GLN
1	A	3824	GLN
1	A	4142	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4313	ASN
1	A	4327	ASN
1	A	4526	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

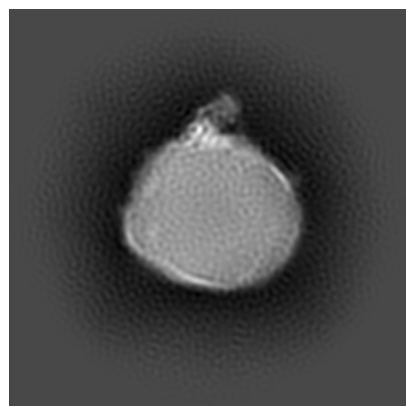
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-47801. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

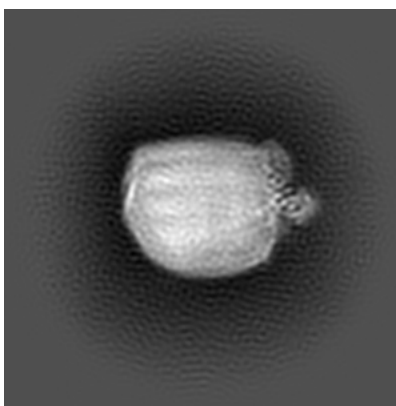
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

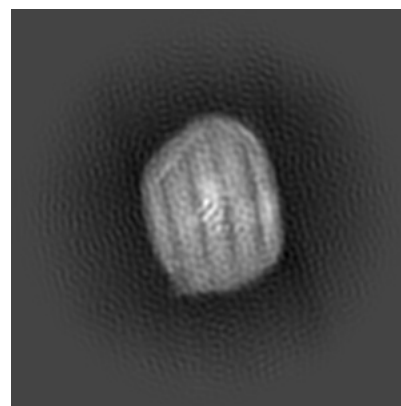
6.1.1 Primary map



X

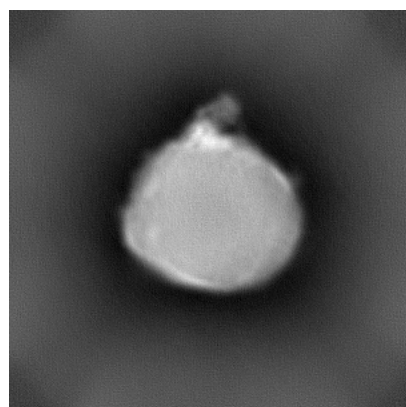


Y

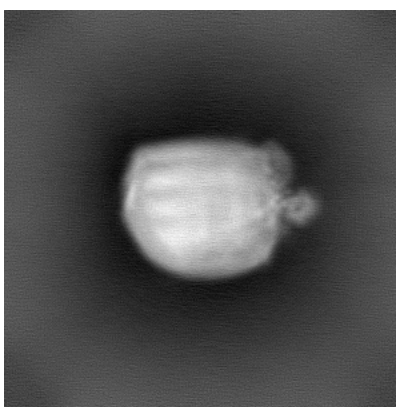


Z

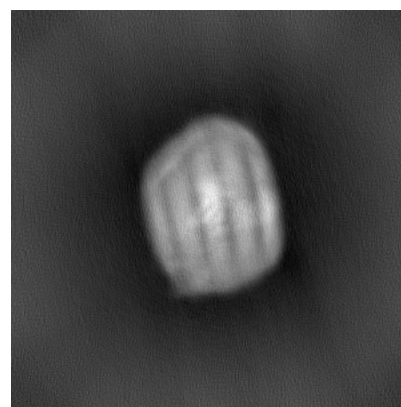
6.1.2 Raw map



X



Y

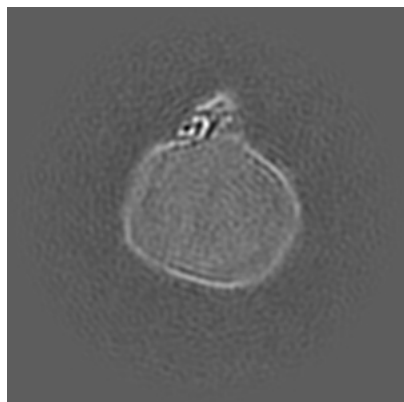


Z

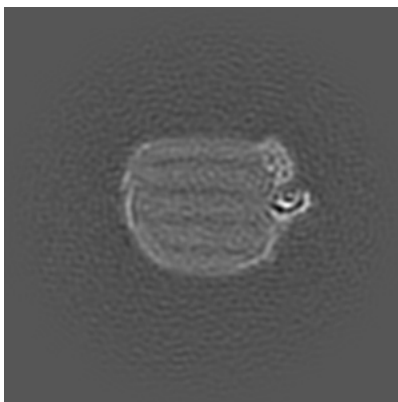
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

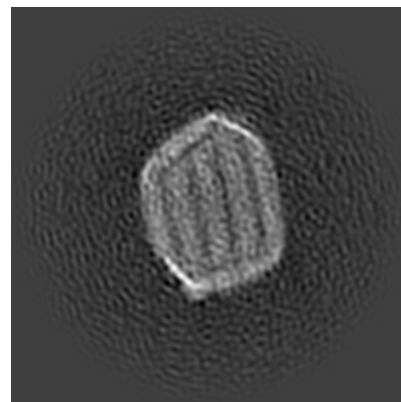
6.2.1 Primary map



X Index: 225

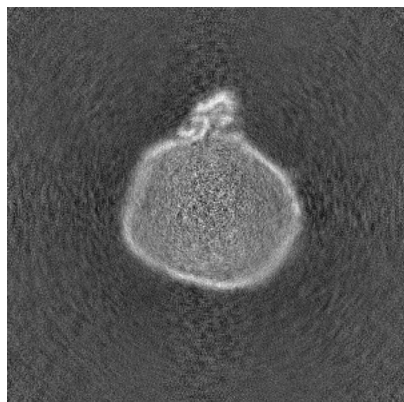


Y Index: 225

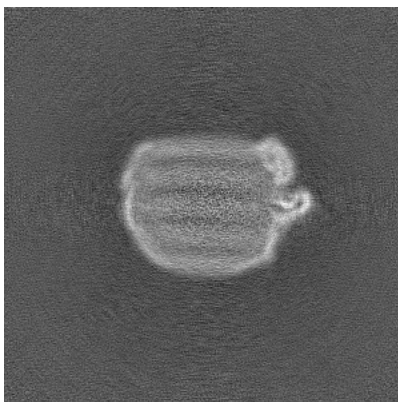


Z Index: 225

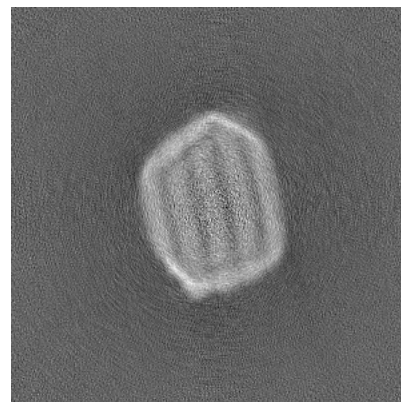
6.2.2 Raw map



X Index: 225



Y Index: 225

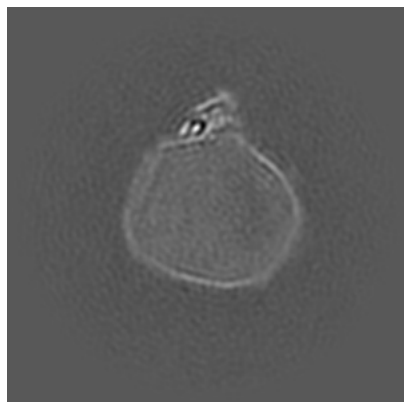


Z Index: 225

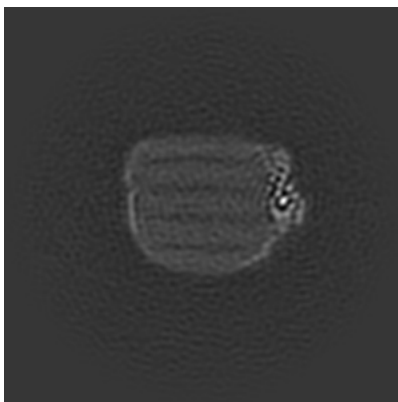
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

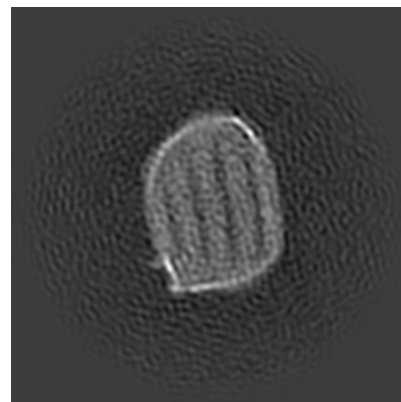
6.3.1 Primary map



X Index: 230

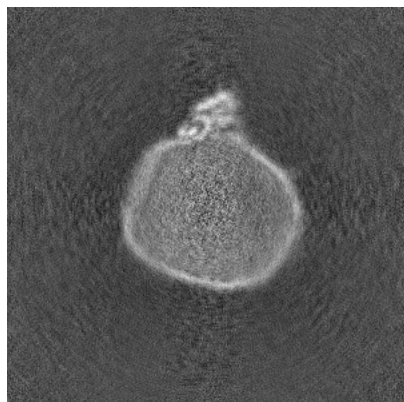


Y Index: 213

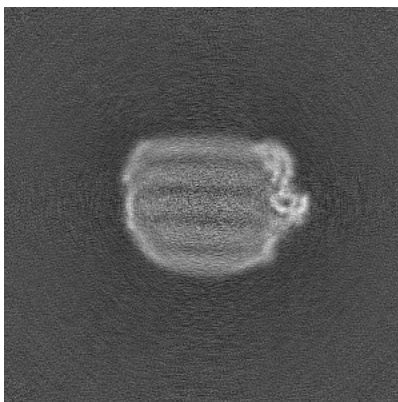


Z Index: 196

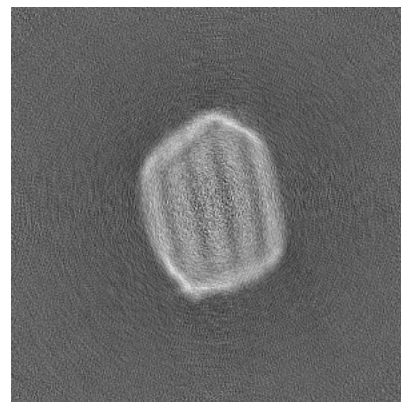
6.3.2 Raw map



X Index: 227



Y Index: 219

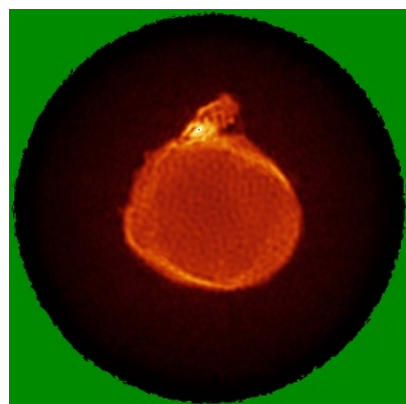


Z Index: 219

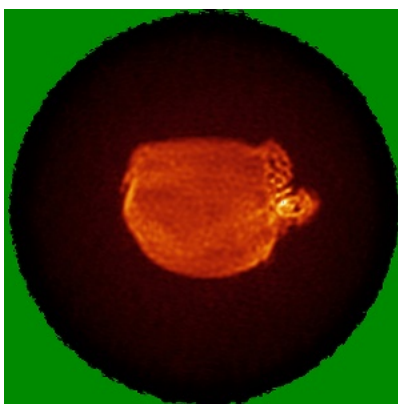
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

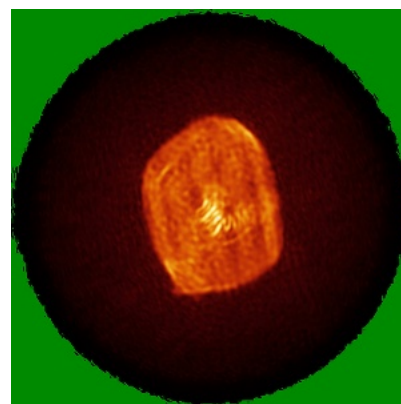
6.4.1 Primary map



X

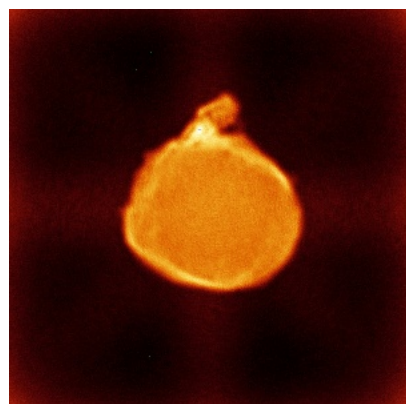


Y

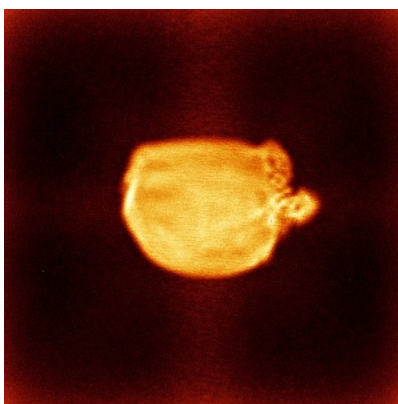


Z

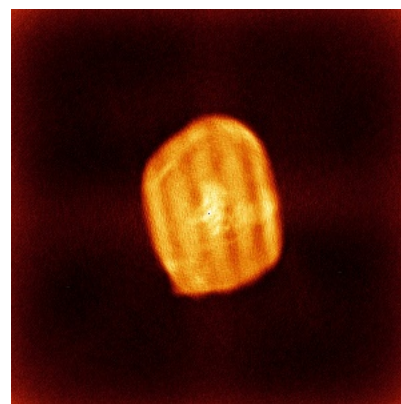
6.4.2 Raw map



X



Y

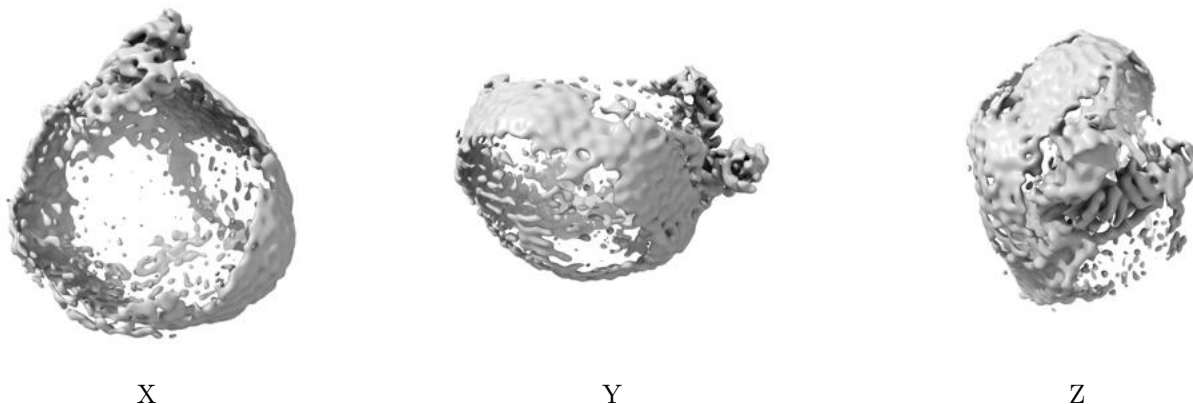


Z

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

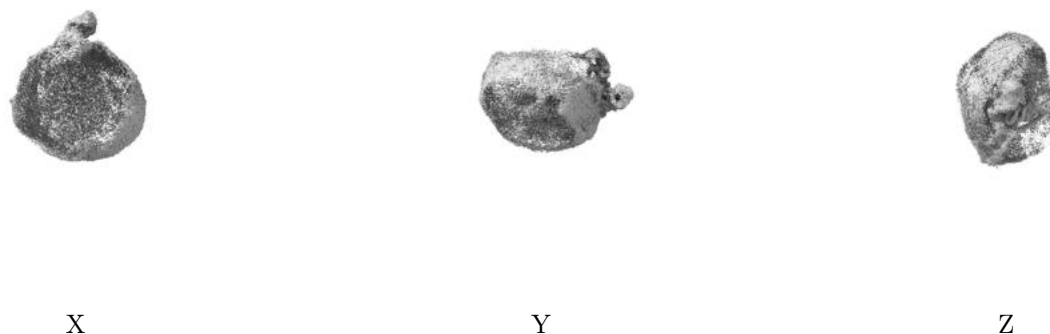
6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.182. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

6.5.2 Raw map



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

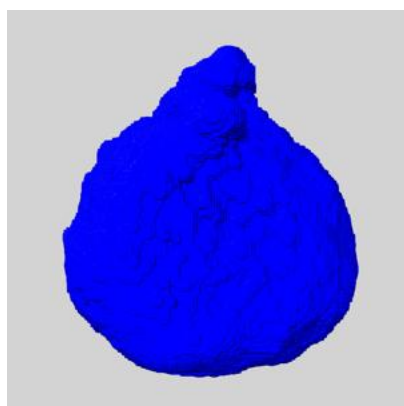
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

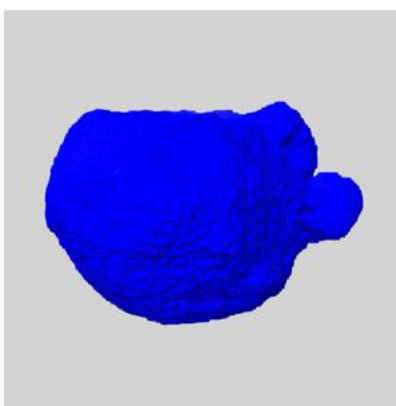
A mask typically either:

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

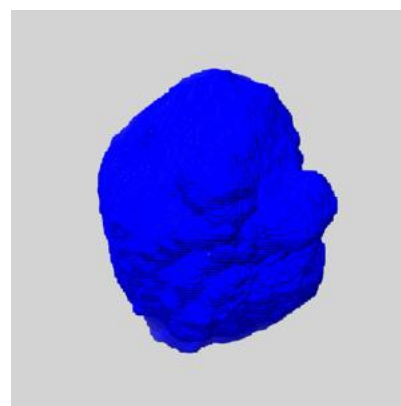
6.6.1 emd_47801_msk_1.map [i](#)



X



Y

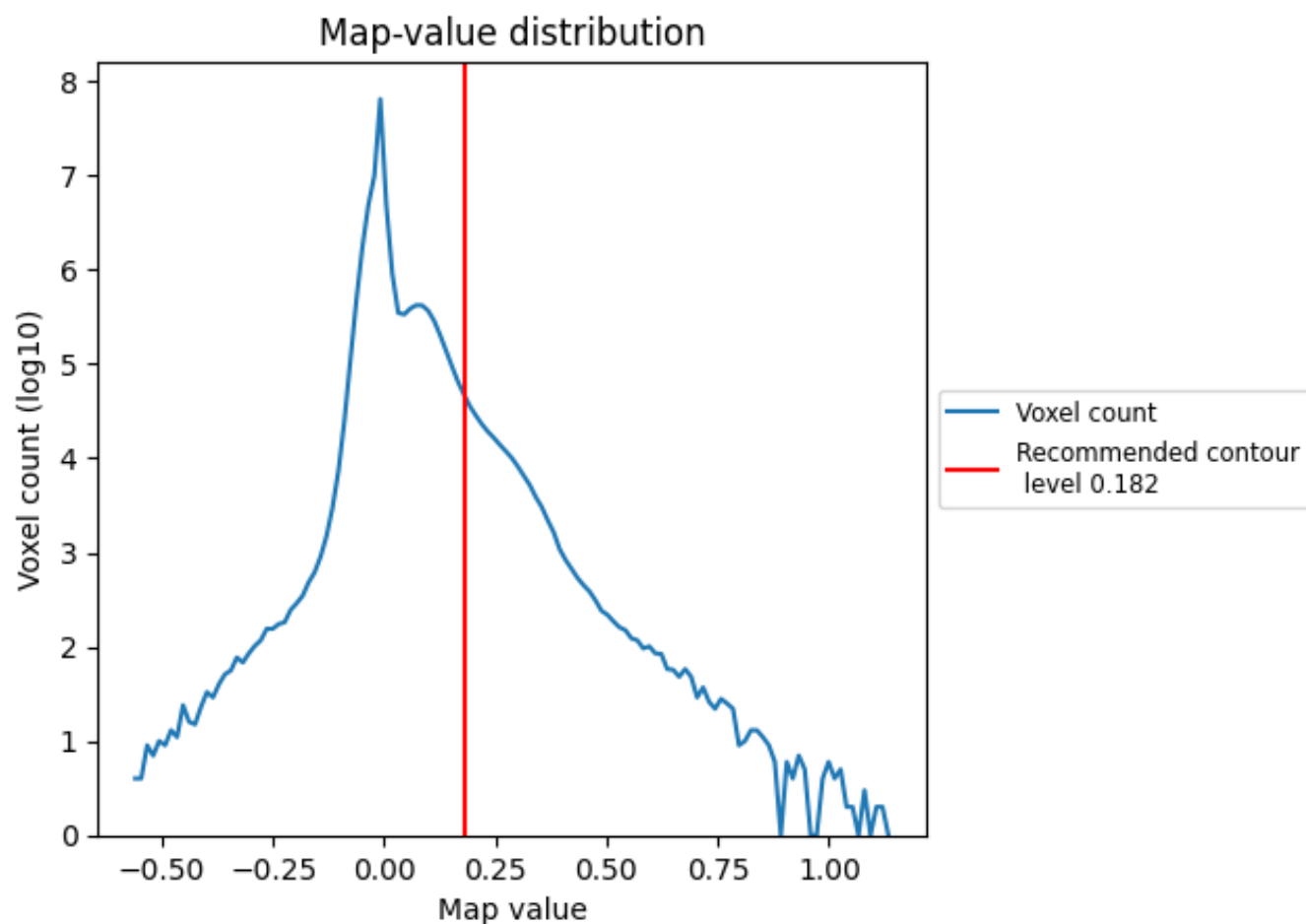


Z

7 Map analysis [i](#)

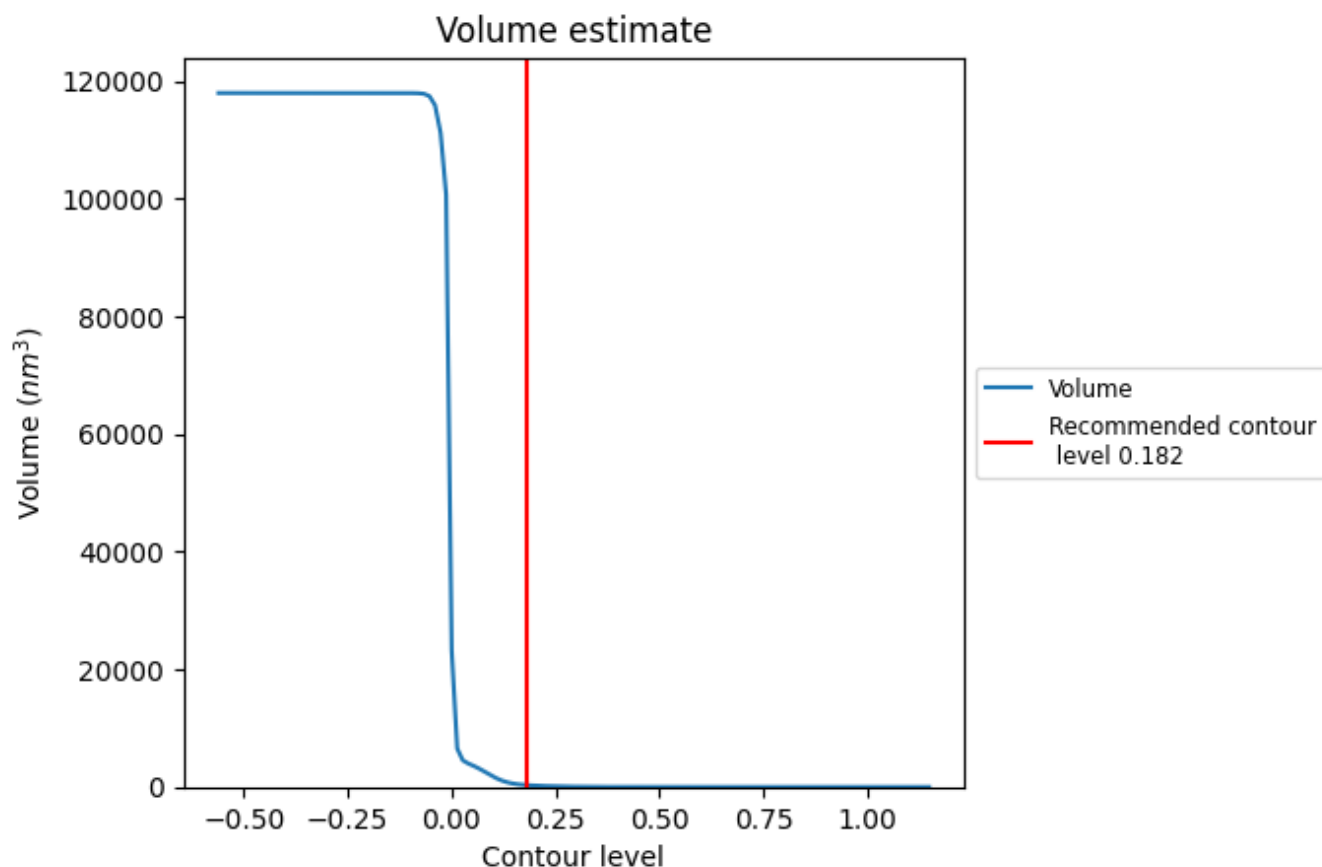
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



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

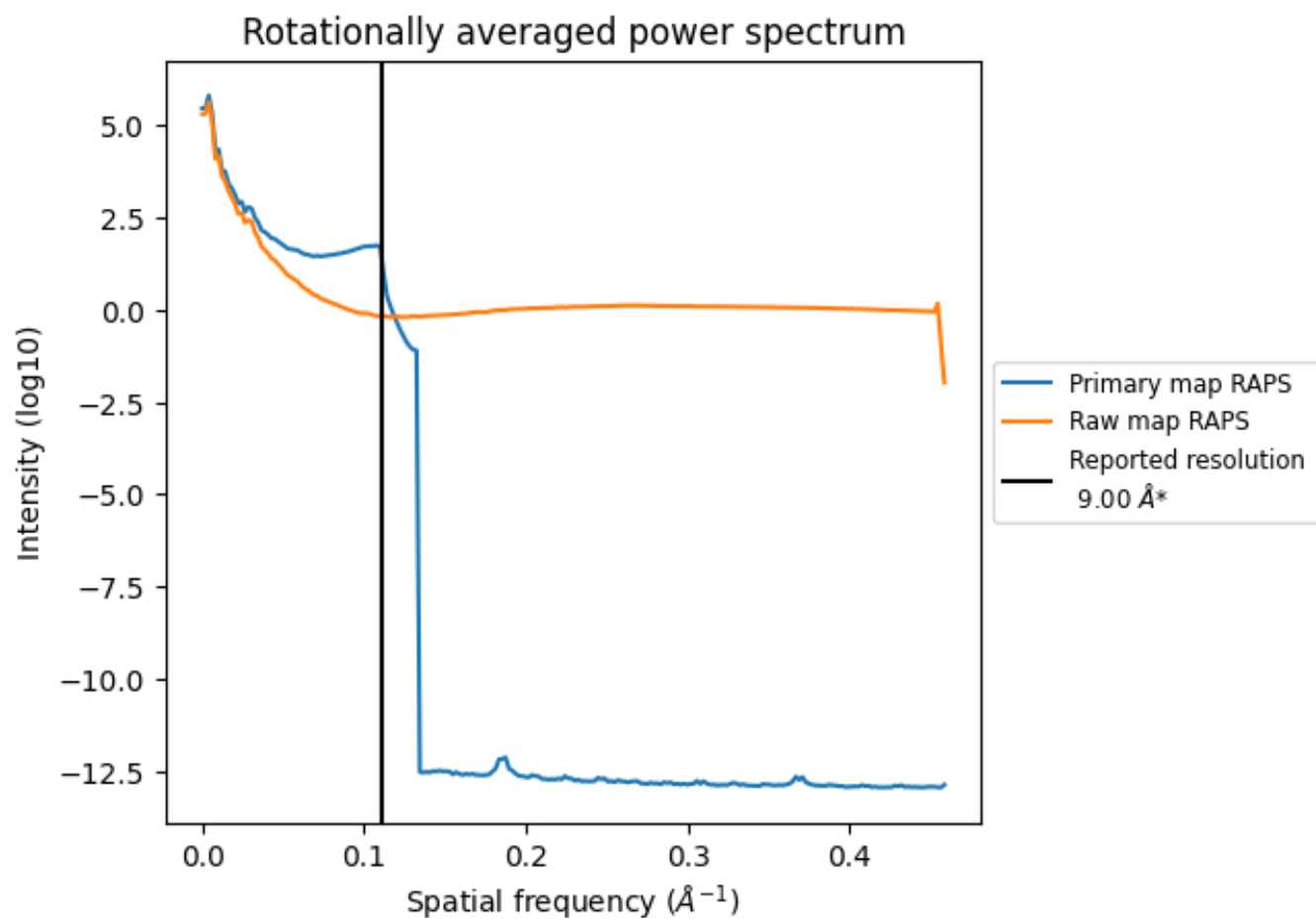
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 304 nm³; this corresponds to an approximate mass of 275 kDa.

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

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ

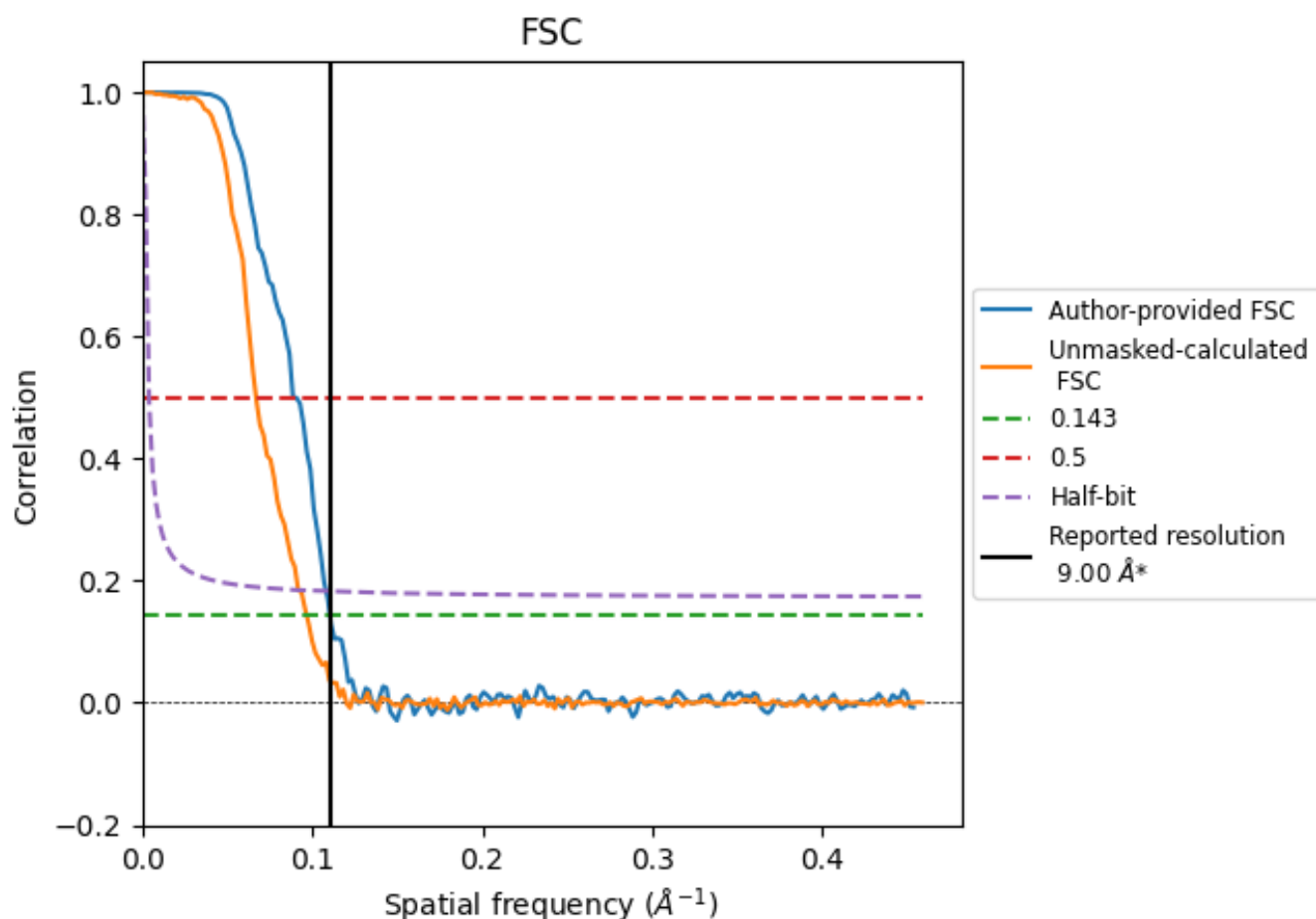


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.111 Å⁻¹

8 Fourier-Shell correlation [i](#)

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

8.1 FSC [i](#)



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of $0.111 \text{ \AA}^{-1}$

8.2 Resolution estimates [i](#)

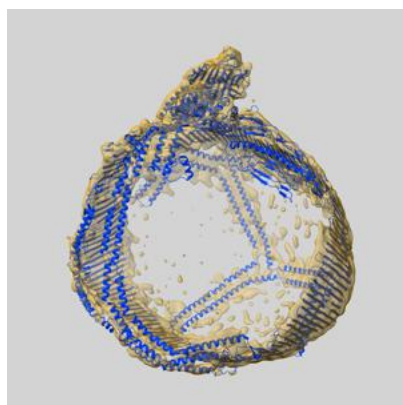
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	9.00	-	-
Author-provided FSC curve	9.06	11.27	9.24
Unmasked-calculated*	10.34	14.93	10.85

*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps. The value from deposited half-maps intersecting FSC 0.143 CUT-OFF 10.34 differs from the reported value 9.0 by more than 10 %

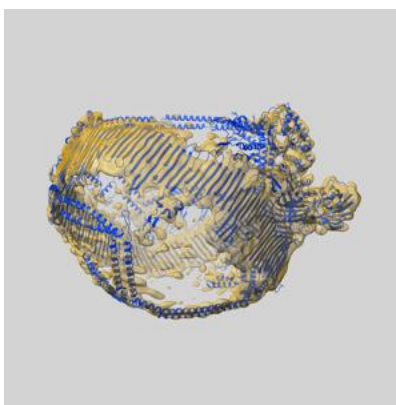
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-47801 and PDB model 9EAG. Per-residue inclusion information can be found in [section 3](#) on [page 4](#).

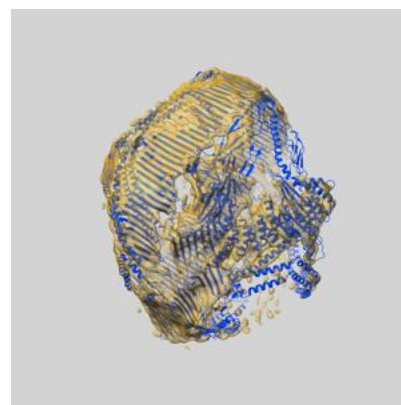
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



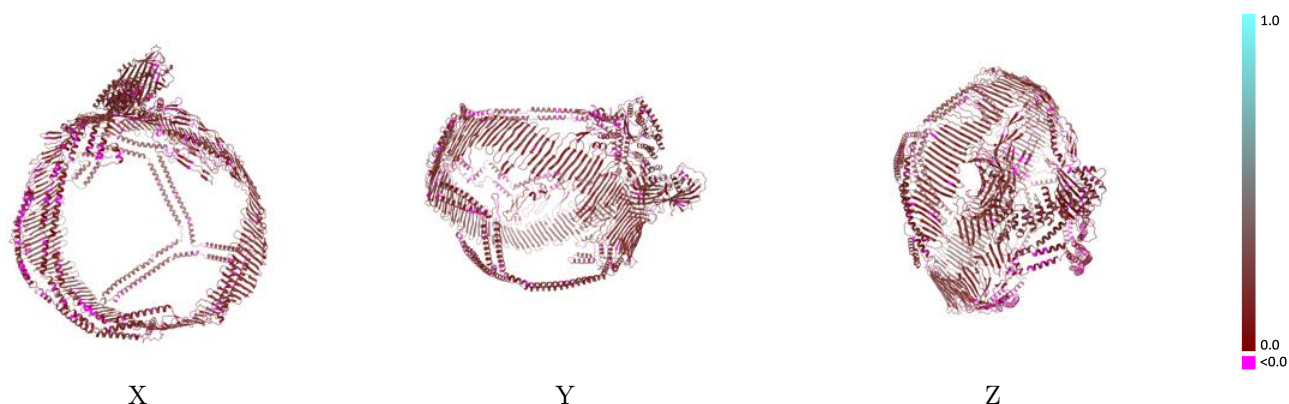
Y



Z

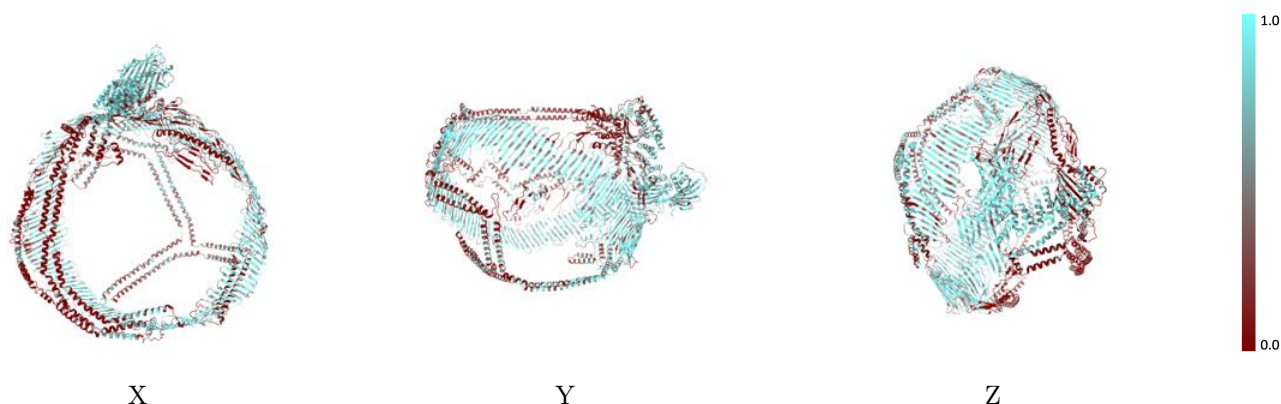
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.182 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



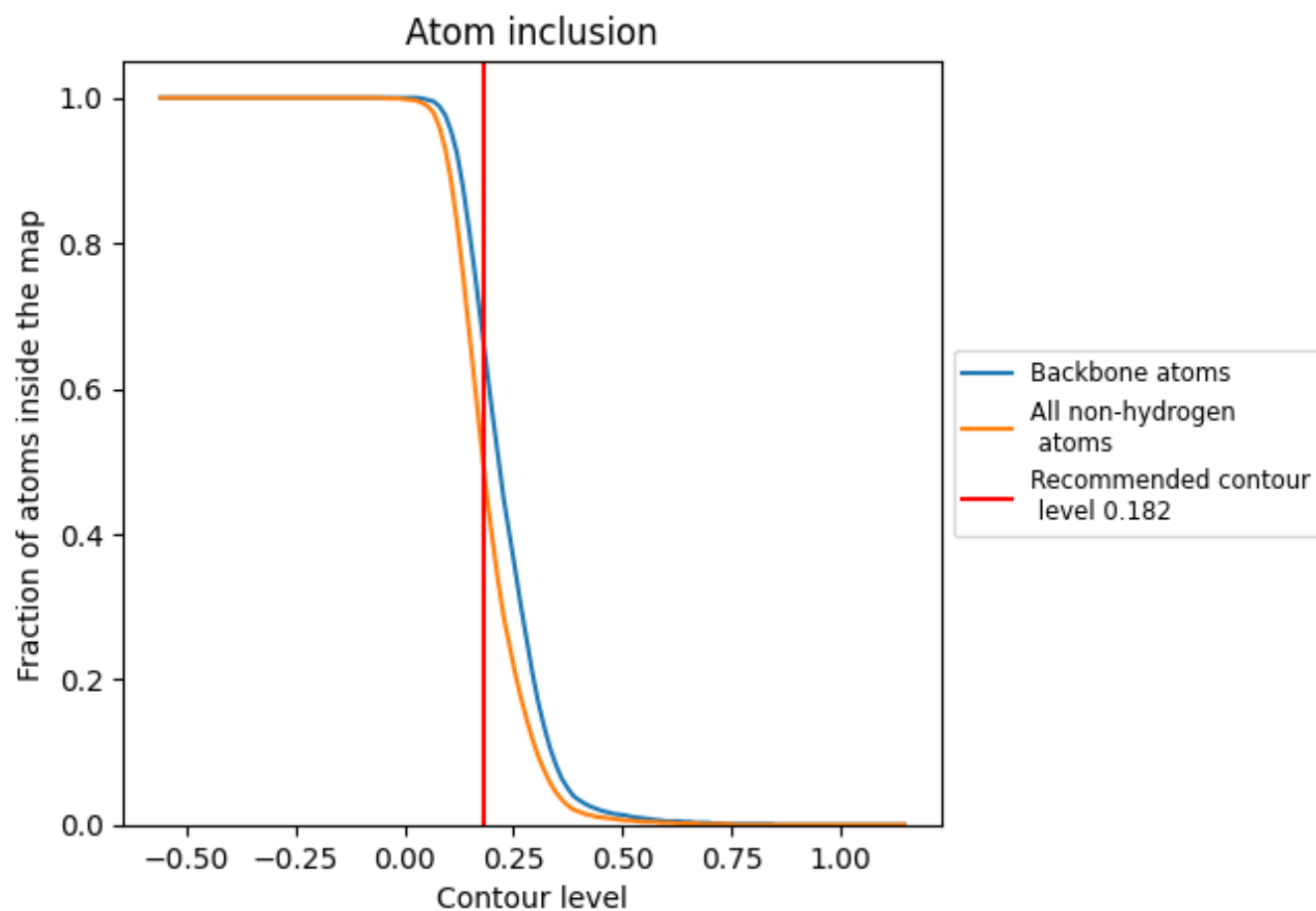
The images above show the model with each residue coloured according its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.182).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 66% of all backbone atoms, 49% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.182) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.4900	0.1570
A	0.4900	0.1570

