



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 05:22 PM UTC

PDB ID : 7EYQ / pdb_00007eyq
EMDB ID : EMD-31384
Title : Cryo-EM (SPA) structure of human Nup155 Longer N-terminus (19-1069) at 5.4 Angstrom resolution
Authors : Niranjan, S.
Deposited on : 2021-05-31
Resolution : 5.40 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

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

The types of validation reports are described at

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

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

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

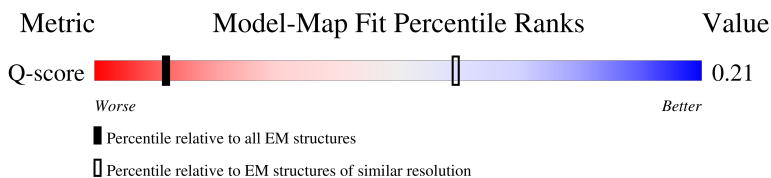
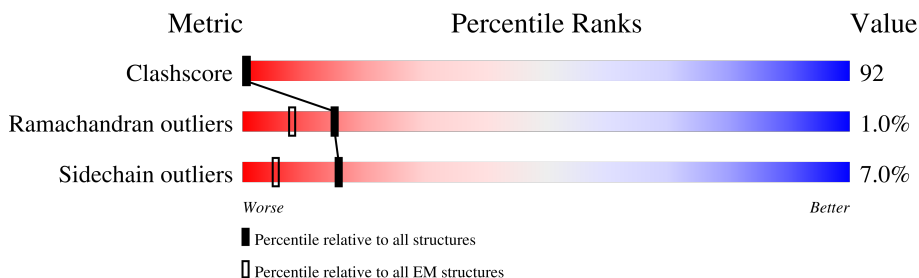
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 5.40 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
Sidechain outliers	223484	23102	-
Q-score	-	25397	538 (4.90 - 5.90)

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	1642	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 6577 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 G protein/GFP fusion protein,Nuclear pore complex protein Nup155.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	833	Total	C	N	O	S	0	0
			6577	4181	1128	1229	39		

There are 12 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-11	SER	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-10	GLY	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-9	LEU	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-8	ARG	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-7	SER	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-6	ARG	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-5	ALA	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-4	GLN	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-3	ALA	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-2	SER	-	linker	UNP B7UCZ6
A	-1	ASN	-	linker	UNP B7UCZ6
A	0	SER	-	linker	UNP B7UCZ6

LEU	TYR	L1024	A964	C844	L784	R723	K622	L541	H480	M420	L359
GLU	TYR	K1025	F965	T845	V785	N724	H663	H542	H481	A421	A360
LYS	LYS	L1026	Q966	T846	K786	S725		Q543	I483	A422	T362
ASN	ASN	S1027	E967	R847	K787		1666	E544	I484	S423	T361
ARG	ARG	Q1028	E968	R848	S788	Q726	C667		T484	H424	H363
PRO	PRO	R1029	L969	N849	V789	F727	1668		M425	M425	A364
ALA	ALA	S1030	N970	N849	Q790		V669		G365	G365	G364
ARG	ASN	K1031	S971	A851	A791	G729	1669		V366	V366	V366
ILE	ASN	D1032	S972	A852	L792	G730	S671		M428	M428	L368
LEU	ALA	E1033	Y972	W852	A793	G731	R672		L367	L367	L367
GLN	ALA	L1034	K973	W853	L794	L732	I673		Y369	Y369	Y369
GLN	ARG	L1034	K973	W854	W795	L732	I674		F370	F370	F370
VAL	VAL	F1035	C974	K854	K796	G733	G675		T372	T372	T372
GLN	LEU	S1036	I975	S855	L797	ASN	N676		C373	C373	C373
LEU	LEU	T1036	T976	S856	L798	PRO	1677		P374	P374	P374
GLU	ARG	I1037	D977	H858	F800	THR	1678		R376	R376	R376
LEU	LEU	A1038	T978	L859	H801	ALA	D679		GLN	GLN	GLN
ALA	ALA	L1039	L979	O860	Q802	LEU	ALA		PRO	PRO	PRO
ASP	ASP	Y1040	L979	D861	F803	LYS	LEU		ALA	ALA	ALA
ARG	ASP	M1041	Q980	T862	T804	VAL	VAL		P382	P382	P382
TYR	TYR	W1042	E981	C863	T805	GLN	VAL		N383	N383	N383
HIS	HIS	L1043	L982	P864	T806	ARG	GLU		T384	T384	T384
THR	THR	I1044	V983	L865	R807	ILE	ARG		L385	L385	L385
ILE	ILE	Q1045	ASN	L866	A808	LEU	ILE		T386	T386	T386
SER	SER	V1046	GLN	S867	E809	GLY	LYS		L387	L387	L387
SER	SER	ASP	SER	S868	L810	PHE	THR		V388	V388	V388
VAL	VAL	LEU	LYS	T869	Q811	MET	GLY		M450	M450	M450
GLN	GLN	ALA	ALA	D870	K812	ARG	ASN		T451	T451	T451
ALA	ALA	ASP	PRO	D871	E813	PRO	GLU		A452	A452	A452
LEU	LEU	LYS	GLN	A872	L814	GLU	ILE		R391	R391	R391
LEU	LEU	LEU	SER	T873	Q815	GLY	THR		L392	L392	L392
TYR	TYR	GLN	SER	C874	E816	ASN	ALA		V454	V454	V454
ASP	ASP	VAL	VAL	S875	Q817	PRO	ILE		D455	D455	D455
ARG	ARG	ALA	PRO	K876	L818	GLN	LEU		G456	G456	G456
ALA	ALA	S1067	LYS	A877	K819	GLN	TYR		H457	H457	H457
GLU	GLU	P1068	LYS	N878	T820	MET	GLY		G395	G395	G395
LEU	LEU	F1069	PRO	E879	T821	GLN	GLY		F396	F396	F396
MET	MET	L1060	GLY	L880	T822	GLU	GLU		S397	S397	S397
ASP	ASP	E1061	PRO	L881	F823	LEU	ALA		A398	A398	A398
THR	THR	P1062	PRO	Q882	D825	GLN	ALA		S399	S399	S399
LYS	LYS	H1063	VAL	R883	L826	LEU	GLN		S400	S400	S400
LEU	LEU	L1064	LEU	S884	V827	ARG	THR		T401	T401	T401
TYR	TYR	V1065	SER	R885	R828	THR	PRO		D465	D465	D465
THR	THR	R1066	ASP	S886	V829	THR	THR		E466	E466	E466
ALA	ALA	M1067	ASP	R886	R829	CYS	LEU		L467	L467	L467
ILE	ILE	K1068	PRO	V887	D830	VAL	PRO		K468	K468	K468
ALA	ALA	VAL	ASN	Q888	T831	THR	PRO		V469	V469	V469
PRO	PRO	ASP	MET	N889	E832	GLY	PRO		D470	D470	D470
ALA	ALA	LEU	LEU	N890	L833	GLY	PRO		K471	K471	K471
PHE	PHE	GLN	SER	N891	T834	ILE	ASN		I472	I472	I472
LEU	LEU	ARG	GLU	T891	G835	VAL	VAL		I473	I473	I473
CYS	CYS	VAL	ALA	E892	H836	VAL	GLY		P475	P475	P475
LYS	LYS	ARG	GLY	R893	L837	THR	PRO		L476	L476	L476
HIS	HIS	TYR	HIS	E894	T838	THR	PRO		M477	M477	M477
LEU	LEU	ASP	ASP	R895	A839	ILE	ILE		K478	K478	K478
LEU	LEU	LEU	LEU	M896	S840	GLY	GLY		D479	D479	D479
TRP	TRP	E1021	Q1022	L897	L841	VAL	VAL				
ARG	ARG	F1020	H1019	R898	K775	GLY	S660				
		M1023	M1023	E899	K776	THR	G661				
				S900	I776	THR					
				N901	I777	THR					
				K902	I778	THR					
				E903	I781	THR					
					Q782	THR					
					Q783	THR					

LEU	ALA	ILE	ASP	ILE	ASP	LEU
ILE	ILE	ILE	PHE	ILE	ASP	LEU
HIS	HIS	ILE	ILE	ILE	PHE	ASP
CYS	CYS	VAL	HIS	VAL	GLN	GLY
ALA	ALA	PHE	VAL	GLN	LEU	TYR
GLY	GLY	LEU	LEU	GLN	GLN	ASP
TYR	TYR	GLN	GLN	TYR	ARG	ILE
SER	ASP	PRO	GLN	GLN	VAL	CYS
ILE	ILE	LEU	VAL	GLU	ASN	THR
VAL	VAL	THR	THR	LEU	PRO	ASN
GLN	GLN	GLN	ASN	GLN	THR	GLN
TRP	TRP	LEU	TRP	LEU	TRP	ASP
ASP	ASP	TRP	VAL	ASP	VAL	GLN
GLN	GLN	VAL	GLY	VAL	GLY	ASP
ASP	ASP	GLY	PHE	VAL	ILE	ILE
ILE	ILE	VAL	ILE	VAL	ILE	ILE
ILE	ILE	ILE	ILE	ILE	ILE	GLU
GLU	GLU	ILE	ILE	ILE	ILE	GLU
LYS	LYS	GLN	THR	THR	THR	GLU
GLU	GLU	THR	MET	LEU	LEU	LEU
LEU	LEU	LEU	ASN	ASN	GLU	ASP
SER	SER	SER	GLU	ASP	ILE	SER
ASP	ASP	SER	ILE	SER	ILE	SER
VAL	VAL	VAL	GLY	GLY	VAL	VAL
THR	THR	THR	VAL	VAL	THR	THR
LEU	LEU	LEU	PRO	PRO	LEU	LEU
SER	SER	SER	LEU	LEU	SER	SER
SER	SER	SER	PRO	PRO	PRO	PRO
ASP	ASP	ASP	ARG	ARG	ARG	ARG
ARG	ARG	ARG	LEU	LEU	LEU	LEU
MET	MET	MET	GLU	GLU	GLU	GLU
HIS	HIS	HIS	VAL	VAL	VAL	VAL
ALA	ALA	ALA	TYR	TYR	TYR	TYR
LEU	LEU	LEU	ASP	ASP	ASP	ASP
GLN	GLN	GLN	GLN	GLN	GLN	GLN
SER	SER	SER	LEU	LEU	LEU	LEU
MET	MET	MET	PHE	PHE	PHE	PHE
LYS	LYS	LYS	LYS	LYS	LYS	LYS
ILE	ILE	ILE	ILE	ILE	ILE	ILE
VAL	VAL	VAL	VAL	VAL	VAL	VAL
LEU	LEU	LEU	PRO	PRO	PRO	PRO
GLY	GLY	GLY	PHE	PHE	PHE	PHE
LYS	LYS	LYS	TRP	TRP	TRP	TRP
THR	THR	THR	ASN	ASN	ASN	ASN
PRO	PRO	PRO	ARG	ARG	ARG	ARG
ARG	ARG	ARG	LYS	LYS	LYS	LYS
THR	THR	THR	LYS	LYS	LYS	LYS
PRO	PRO	PRO	PRO	PRO	PRO	PRO
ARG	ARG	ARG	PRO	PRO	PRO	PRO
PHE	PHE	PHE	LEU	LEU	LEU	LEU
ASP	ASP	ASP	HIS	HIS	HIS	HIS
LEU	LEU	LEU	LEU	LEU	LEU	LEU

GLN
ALA
LYS
LEU
GLU
ARG
LEU
HIS

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	37100	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	1.15	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	2.577	Depositor
Minimum map value	-1.262	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.044	Depositor
Recommended contour level	0.26	Depositor
Map size ($\text{\AA}$)	230.44, 230.44, 230.44	wwPDB
Map dimensions	280, 280, 280	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing ($\text{\AA}$)	0.823, 0.823, 0.823	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.32	0/6702	0.86	17/9069 (0.2%)

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

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	A	0	1

There are no bond length outliers.

All (17) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	40	TYR	CA-C-N	27.43	154.13	119.84
1	A	40	TYR	C-N-CA	27.43	154.13	119.84
1	A	44	SER	N-CA-C	-12.31	97.55	111.71
1	A	826	LEU	N-CA-C	10.67	124.20	111.82
1	A	839	ALA	N-CA-C	-9.61	101.11	113.12
1	A	42	ASP	N-CA-C	-8.21	97.25	109.81
1	A	139	GLY	N-CA-C	7.34	121.54	112.73
1	A	40	TYR	C-N-CD	-6.83	97.01	125.00
1	A	53	ASN	N-CA-C	6.28	118.13	110.41
1	A	1034	LEU	N-CA-C	-6.13	104.66	111.71
1	A	826	LEU	N-CA-CB	-5.49	101.76	110.28
1	A	853	ASP	N-CA-C	-5.26	105.55	111.28
1	A	966	GLN	CA-C-N	5.14	131.37	121.54
1	A	966	GLN	C-N-CA	5.14	131.37	121.54
1	A	816	GLU	N-CA-C	5.11	118.29	111.24
1	A	44	SER	CA-C-N	-5.04	113.07	122.09
1	A	44	SER	C-N-CA	-5.04	113.07	122.09

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	40	TYR	Peptide

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	6577	0	6592	1214	0
All	All	6577	0	6592	1214	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 92.

All (1214) 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:801:HIS:HB3	1:A:841:LEU:CB	1.33	1.57
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ARG:CG	1.45	1.43
1:A:801:HIS:ND1	1:A:841:LEU:HD13	1.34	1.40
1:A:843:ASN:ND2	1:A:879:GLU:HA	1.44	1.33
1:A:879:GLU:CG	1:A:905:GLN:HE21	1.45	1.29
1:A:930:VAL:HG13	1:A:1035:PHE:CE1	1.67	1.29
1:A:920:TYR:CZ	1:A:923:VAL:HG11	1.68	1.28
1:A:982:LEU:HD21	1:A:1020:PHE:CD2	1.69	1.28
1:A:840:SER:OG	1:A:878:ASN:HB3	1.32	1.26
1:A:926:TYR:CB	1:A:1023:MET:HE2	1.66	1.25
1:A:838:ILE:CA	1:A:841:LEU:HD11	1.65	1.25
1:A:137:PHE:CE2	1:A:140:LEU:HD12	1.71	1.25
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ARG:CD	1.64	1.24
1:A:69:GLY:HA3	1:A:401:THR:CG2	1.67	1.24
1:A:834:THR:HA	1:A:837:LEU:CD2	1.70	1.21
1:A:69:GLY:CA	1:A:401:THR:HG22	1.69	1.21
1:A:553:ILE:HG13	1:A:669:TYR:CE1	1.73	1.21
1:A:879:GLU:O	1:A:883:ARG:HG2	1.41	1.20
1:A:801:HIS:CB	1:A:841:LEU:HB2	1.71	1.20
1:A:805:ILE:HA	1:A:817:GLN:CB	1.72	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:57:VAL:HG13	1:A:390:VAL:O	1.40	1.18
1:A:805:ILE:HA	1:A:817:GLN:HB3	1.21	1.17
1:A:920:TYR:CE2	1:A:923:VAL:HG11	1.78	1.17
1:A:797:LEU:HG	1:A:801:HIS:CE1	1.78	1.17
1:A:843:ASN:HB3	1:A:905:GLN:NE2	1.59	1.16
1:A:801:HIS:CB	1:A:841:LEU:CB	2.24	1.15
1:A:46:LEU:HD11	1:A:444:PRO:HB3	1.27	1.15
1:A:843:ASN:HD22	1:A:879:GLU:CA	1.60	1.15
1:A:525:VAL:HG22	1:A:568:TRP:CZ3	1.82	1.14
1:A:979:LEU:HD11	1:A:1020:PHE:CE1	1.84	1.12
1:A:41:PRO:HG2	1:A:45:GLU:HG2	1.17	1.12
1:A:801:HIS:HB3	1:A:841:LEU:HB3	1.29	1.12
1:A:889:ASN:HD21	1:A:897:LEU:CG	1.60	1.12
1:A:801:HIS:CG	1:A:841:LEU:HD13	1.85	1.12
1:A:926:TYR:HB2	1:A:1023:MET:CE	1.78	1.12
1:A:804:THR:CA	1:A:807:VAL:HG13	1.78	1.12
1:A:843:ASN:HB3	1:A:879:GLU:HG2	1.23	1.12
1:A:862:ILE:CG2	1:A:869:THR:HG22	1.79	1.12
1:A:1019:HIS:O	1:A:1023:MET:HG2	1.50	1.11
1:A:40:TYR:CE1	1:A:46:LEU:HD22	1.85	1.11
1:A:676:ASN:HA	1:A:702:VAL:HG22	1.24	1.10
1:A:373:CYS:N	1:A:382:PRO:HA	1.67	1.09
1:A:862:ILE:HG21	1:A:869:THR:HB	1.27	1.09
1:A:369:TYR:HB2	1:A:389:HIS:CD2	1.89	1.08
1:A:880:LEU:CA	1:A:883:ARG:CG	2.31	1.08
1:A:553:ILE:HG13	1:A:669:TYR:HE1	0.92	1.08
1:A:838:ILE:HA	1:A:841:LEU:CG	1.82	1.08
1:A:804:THR:HA	1:A:807:VAL:HG13	1.25	1.08
1:A:889:ASN:HD21	1:A:897:LEU:CB	1.65	1.08
1:A:930:VAL:HG13	1:A:1035:PHE:CD1	1.89	1.07
1:A:806:ILE:HG22	1:A:809:GLU:HB2	1.36	1.05
1:A:838:ILE:HG12	1:A:838:ILE:O	1.26	1.05
1:A:982:LEU:HD11	1:A:1020:PHE:HB3	1.40	1.04
1:A:838:ILE:HA	1:A:841:LEU:CD1	1.87	1.04
1:A:804:THR:HA	1:A:807:VAL:CG1	1.88	1.04
1:A:375:PHE:HB3	1:A:384:THR:OG1	1.58	1.03
1:A:843:ASN:CB	1:A:879:GLU:HG2	1.88	1.03
1:A:845:TYR:CE2	1:A:848:ASP:HA	1.92	1.03
1:A:806:ILE:HG23	1:A:809:GLU:OE2	1.56	1.03
1:A:838:ILE:HA	1:A:841:LEU:CD2	1.88	1.03
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ARG:HG2	1.39	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:ASN:ND2	1:A:897:LEU:HG	1.73	1.03
1:A:114:ARG:HH22	1:A:198:MET:HE2	1.20	1.02
1:A:497:PRO:HG3	1:A:515:ARG:CZ	1.90	1.02
1:A:46:LEU:CD1	1:A:444:PRO:HB3	1.88	1.01
1:A:834:THR:HA	1:A:837:LEU:HD21	1.02	1.01
1:A:838:ILE:HA	1:A:841:LEU:HD21	1.39	1.01
1:A:926:TYR:OH	1:A:978:THR:HG22	1.61	1.01
1:A:137:PHE:HE2	1:A:140:LEU:HD12	1.05	1.01
1:A:879:GLU:HG3	1:A:905:GLN:HE21	1.23	1.01
1:A:920:TYR:CE2	1:A:923:VAL:CG1	2.43	1.00
1:A:862:ILE:HG21	1:A:869:THR:CB	1.91	1.00
1:A:930:VAL:CG1	1:A:1035:PHE:CE1	2.44	1.00
1:A:838:ILE:HA	1:A:841:LEU:HD11	1.38	1.00
1:A:862:ILE:CG2	1:A:869:THR:CG2	2.39	1.00
1:A:880:LEU:HG	1:A:883:ARG:HD3	1.41	1.00
1:A:889:ASN:HD21	1:A:897:LEU:HG	1.20	0.99
1:A:838:ILE:O	1:A:842:ILE:HG12	1.60	0.99
1:A:834:THR:CA	1:A:837:LEU:HD21	1.93	0.98
1:A:844:CYS:SG	1:A:882:GLN:HB3	2.03	0.98
1:A:805:ILE:HA	1:A:817:GLN:CG	1.93	0.98
1:A:838:ILE:CA	1:A:841:LEU:CD1	2.41	0.98
1:A:357:GLN:OE1	1:A:372:THR:HB	1.64	0.97
1:A:840:SER:HG	1:A:878:ASN:HB3	1.26	0.97
1:A:801:HIS:ND1	1:A:841:LEU:CD1	2.27	0.97
1:A:898:ARG:HD3	1:A:927:GLU:HG3	1.46	0.96
1:A:797:LEU:CD2	1:A:801:HIS:HE1	1.78	0.96
1:A:834:THR:O	1:A:837:LEU:HG	1.64	0.96
1:A:219:THR:HG1	1:A:227:PHE:HE2	1.13	0.96
1:A:369:TYR:CB	1:A:389:HIS:CD2	2.49	0.96
1:A:979:LEU:HD11	1:A:1020:PHE:CD1	2.00	0.96
1:A:879:GLU:OE1	1:A:883:ARG:HD2	1.65	0.96
1:A:550:THR:HA	1:A:553:ILE:CG2	1.96	0.96
1:A:920:TYR:O	1:A:923:VAL:HG12	1.63	0.96
1:A:840:SER:OG	1:A:878:ASN:CB	2.13	0.95
1:A:982:LEU:HD21	1:A:1020:PHE:CG	2.00	0.95
1:A:972:TYR:CD1	1:A:1038:ALA:HB1	2.02	0.95
1:A:889:ASN:OD1	1:A:897:LEU:HB2	1.66	0.95
1:A:877:ALA:HA	1:A:919:GLN:HG2	1.48	0.95
1:A:982:LEU:CD2	1:A:1020:PHE:CG	2.50	0.94
1:A:880:LEU:CA	1:A:883:ARG:HG2	1.94	0.94
1:A:43:LEU:HD11	1:A:353:SER:HB2	1.48	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:879:GLU:HG2	1:A:905:GLN:HE21	1.32	0.94
1:A:879:GLU:CG	1:A:905:GLN:NE2	2.30	0.94
1:A:889:ASN:ND2	1:A:897:LEU:CG	2.31	0.93
1:A:87:VAL:HG11	1:A:128:TYR:HB2	1.50	0.93
1:A:40:TYR:CE1	1:A:46:LEU:CD2	2.51	0.93
1:A:857:LEU:HD13	1:A:861:ASP:OD2	1.69	0.93
1:A:220:SER:HA	1:A:227:PHE:CZ	2.04	0.93
1:A:114:ARG:NH2	1:A:198:MET:HE2	1.85	0.92
1:A:41:PRO:HG2	1:A:45:GLU:CG	1.99	0.92
1:A:797:LEU:CG	1:A:801:HIS:CE1	2.51	0.92
1:A:982:LEU:CD2	1:A:1020:PHE:CD2	2.51	0.92
1:A:804:THR:C	1:A:807:VAL:HG13	1.95	0.92
1:A:979:LEU:CD1	1:A:1020:PHE:CD1	2.53	0.91
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ARG:HG3	1.53	0.91
1:A:880:LEU:HA	1:A:883:ARG:HD3	1.50	0.91
1:A:805:ILE:CA	1:A:817:GLN:HB3	2.01	0.91
1:A:553:ILE:HB	1:A:669:TYR:CD1	2.06	0.90
1:A:553:ILE:CG1	1:A:669:TYR:CE1	2.52	0.90
1:A:801:HIS:HB3	1:A:841:LEU:HB2	0.91	0.90
1:A:898:ARG:NH2	1:A:927:GLU:HG2	1.86	0.90
1:A:554:LEU:HD23	1:A:569:ALA:HB2	1.54	0.90
1:A:804:THR:HB	1:A:807:VAL:HG11	1.53	0.90
1:A:879:GLU:C	1:A:883:ARG:HG2	1.96	0.89
1:A:373:CYS:C	1:A:382:PRO:N	2.31	0.89
1:A:137:PHE:CE2	1:A:140:LEU:CD1	2.56	0.89
1:A:550:THR:HA	1:A:553:ILE:HG22	1.54	0.89
1:A:833:LEU:O	1:A:837:LEU:HD23	1.72	0.88
1:A:982:LEU:HD11	1:A:1020:PHE:CB	2.03	0.88
1:A:369:TYR:HB3	1:A:389:HIS:NE2	1.88	0.88
1:A:920:TYR:CE1	1:A:923:VAL:HG11	2.09	0.88
1:A:137:PHE:HE2	1:A:140:LEU:CD1	1.86	0.87
1:A:862:ILE:CG2	1:A:869:THR:CB	2.51	0.87
1:A:550:THR:O	1:A:554:LEU:CB	2.22	0.87
1:A:838:ILE:C	1:A:841:LEU:HD11	1.99	0.87
1:A:842:ILE:CG2	1:A:904:TYR:O	2.23	0.87
1:A:549:ALA:O	1:A:553:ILE:HG22	1.73	0.87
1:A:219:THR:OG1	1:A:227:PHE:HE2	1.57	0.87
1:A:349:GLU:HG3	1:A:475:PRO:HD3	1.54	0.87
1:A:797:LEU:HG	1:A:801:HIS:NE2	1.89	0.87
1:A:57:VAL:CG1	1:A:390:VAL:O	2.21	0.86
1:A:241:GLN:HG3	1:A:243:GLU:H	1.40	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:801:HIS:CE1	1:A:841:LEU:HD13	2.11	0.86
1:A:838:ILE:O	1:A:838:ILE:CG1	2.18	0.85
1:A:551:CYS:HA	1:A:569:ALA:HB1	1.58	0.85
1:A:521:ARG:HB3	1:A:554:LEU:HD11	1.59	0.85
1:A:803:PHE:CE1	1:A:840:SER:HB3	2.11	0.85
1:A:244:ALA:HA	1:A:250:ARG:HE	1.40	0.85
1:A:391:ARG:HH21	1:A:447:GLU:HG2	1.41	0.85
1:A:842:ILE:HG21	1:A:904:TYR:O	1.76	0.85
1:A:889:ASN:ND2	1:A:897:LEU:CB	2.39	0.85
1:A:797:LEU:CD2	1:A:801:HIS:CE1	2.60	0.85
1:A:806:ILE:CG2	1:A:809:GLU:OE2	2.25	0.85
1:A:880:LEU:CA	1:A:883:ARG:CD	2.54	0.84
1:A:804:THR:CA	1:A:807:VAL:CG1	2.51	0.84
1:A:926:TYR:HB2	1:A:1023:MET:HE2	0.87	0.84
1:A:499:LYS:HA	1:A:512:HIS:HA	1.59	0.84
1:A:114:ARG:HD2	1:A:180:TYR:HE1	1.43	0.84
1:A:373:CYS:CA	1:A:382:PRO:HA	2.07	0.84
1:A:862:ILE:CG2	1:A:869:THR:HB	2.08	0.84
1:A:834:THR:O	1:A:838:ILE:HG22	1.78	0.84
1:A:930:VAL:HG13	1:A:1035:PHE:HE1	1.43	0.84
1:A:972:TYR:OH	1:A:1042:TRP:HB2	1.78	0.83
1:A:791:ALA:O	1:A:795:TRP:HB3	1.78	0.83
1:A:862:ILE:HG22	1:A:869:THR:HG22	1.59	0.83
1:A:489:VAL:HG22	1:A:672:ARG:HH12	1.42	0.83
1:A:936:ALA:O	1:A:940:LYS:HB2	1.78	0.83
1:A:182:ASN:HA	1:A:196:GLY:HA2	1.61	0.83
1:A:57:VAL:HA	1:A:390:VAL:H	1.41	0.83
1:A:838:ILE:C	1:A:841:LEU:CD1	2.52	0.83
1:A:889:ASN:CG	1:A:897:LEU:HB2	2.04	0.82
1:A:801:HIS:HB2	1:A:841:LEU:HD22	1.61	0.82
1:A:220:SER:HA	1:A:227:PHE:CE1	2.14	0.82
1:A:292:TYR:CE1	1:A:372:THR:HG21	2.15	0.82
1:A:838:ILE:O	1:A:841:LEU:CD1	2.27	0.82
1:A:1023:MET:HE1	1:A:1026:LEU:HD12	1.60	0.82
1:A:857:LEU:O	1:A:861:ASP:HB2	1.80	0.82
1:A:880:LEU:HG	1:A:883:ARG:HH11	1.42	0.82
1:A:843:ASN:CB	1:A:905:GLN:NE2	2.42	0.82
1:A:123:ILE:HG13	1:A:137:PHE:HB3	1.60	0.82
1:A:840:SER:HA	1:A:843:ASN:ND2	1.94	0.82
1:A:106:MET:HA	1:A:117:LEU:HA	1.61	0.81
1:A:844:CYS:SG	1:A:886:GLN:HG2	2.20	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:216:LEU:HG	1:A:230:GLY:HA2	1.61	0.81
1:A:879:GLU:CD	1:A:883:ARG:HD2	2.04	0.81
1:A:675:GLY:HA2	1:A:678:TRP:HB2	1.62	0.81
1:A:676:ASN:CA	1:A:702:VAL:HG22	2.09	0.81
1:A:792:LEU:O	1:A:796:LYS:N	2.14	0.81
1:A:883:ARG:HH21	1:A:897:LEU:HB3	1.44	0.81
1:A:804:THR:O	1:A:807:VAL:HG22	1.81	0.81
1:A:843:ASN:CG	1:A:882:GLN:HB2	2.06	0.81
1:A:920:TYR:CZ	1:A:923:VAL:CG1	2.61	0.80
1:A:65:TYR:HB3	1:A:396:PHE:HB2	1.61	0.80
1:A:114:ARG:HD2	1:A:180:TYR:CE1	2.16	0.80
1:A:41:PRO:HB2	1:A:45:GLU:HB3	1.63	0.80
1:A:948:HIS:HA	1:A:951:LYS:HB3	1.61	0.80
1:A:982:LEU:CD1	1:A:1020:PHE:CB	2.59	0.80
1:A:838:ILE:CB	1:A:841:LEU:HD11	2.11	0.80
1:A:857:LEU:CD1	1:A:861:ASP:OD2	2.30	0.80
1:A:553:ILE:HB	1:A:669:TYR:HD1	1.44	0.79
1:A:889:ASN:OD1	1:A:894:GLU:HA	1.81	0.79
1:A:142:GLU:HB2	1:A:169:THR:HB	1.62	0.79
1:A:805:ILE:HA	1:A:817:GLN:HG2	1.64	0.79
1:A:137:PHE:CD2	1:A:140:LEU:HD12	2.17	0.79
1:A:845:TYR:CZ	1:A:848:ASP:HA	2.17	0.79
1:A:553:ILE:CB	1:A:669:TYR:CD1	2.65	0.79
1:A:1023:MET:CE	1:A:1026:LEU:HD12	2.14	0.78
1:A:843:ASN:OD1	1:A:882:GLN:HB2	1.84	0.78
1:A:357:GLN:CB	1:A:372:THR:HG22	2.13	0.78
1:A:797:LEU:HD21	1:A:801:HIS:HE1	1.48	0.78
1:A:889:ASN:ND2	1:A:897:LEU:HB2	1.99	0.78
1:A:334:ILE:HD12	1:A:337:SER:HB3	1.64	0.78
1:A:417:ILE:HA	1:A:420:MET:HB2	1.65	0.77
1:A:982:LEU:HD13	1:A:1020:PHE:HB2	1.65	0.77
1:A:90:PRO:HB3	1:A:134:LEU:HD22	1.66	0.77
1:A:114:ARG:NH1	1:A:125:MET:HB3	2.00	0.77
1:A:801:HIS:CG	1:A:841:LEU:HB2	2.19	0.77
1:A:373:CYS:C	1:A:382:PRO:CA	2.57	0.77
1:A:523:LEU:HA	1:A:526:SER:HB3	1.67	0.77
1:A:803:PHE:CZ	1:A:840:SER:CB	2.68	0.77
1:A:879:GLU:HG2	1:A:905:GLN:NE2	1.96	0.77
1:A:880:LEU:CG	1:A:883:ARG:HD3	2.14	0.77
1:A:838:ILE:O	1:A:841:LEU:HD12	1.85	0.77
1:A:909:ASN:HA	1:A:932:LEU:HD11	1.66	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:46:LEU:HD11	1:A:444:PRO:CB	2.13	0.77
1:A:69:GLY:HA3	1:A:401:THR:HG22	0.82	0.77
1:A:357:GLN:HB2	1:A:372:THR:HG22	1.67	0.77
1:A:527:ASN:O	1:A:528:VAL:C	2.27	0.77
1:A:801:HIS:HD1	1:A:841:LEU:HD13	1.47	0.76
1:A:805:ILE:CA	1:A:817:GLN:CB	2.61	0.76
1:A:862:ILE:HG22	1:A:862:ILE:O	1.84	0.76
1:A:982:LEU:HD22	1:A:1020:PHE:CG	2.20	0.76
1:A:41:PRO:CG	1:A:45:GLU:HG2	2.10	0.76
1:A:862:ILE:HG23	1:A:869:THR:HG22	1.65	0.76
1:A:948:HIS:CE1	1:A:951:LYS:HG3	2.21	0.76
1:A:106:MET:HG3	1:A:117:LEU:HD13	1.69	0.75
1:A:153:LYS:N	1:A:240:TYR:OH	2.20	0.75
1:A:207:SER:H	1:A:251:CYS:H	1.35	0.75
1:A:843:ASN:HB3	1:A:879:GLU:CG	2.10	0.75
1:A:837:LEU:O	1:A:841:LEU:HG	1.86	0.75
1:A:844:CYS:SG	1:A:882:GLN:OE1	2.45	0.75
1:A:827:VAL:HG12	1:A:828:ILE:HG23	1.67	0.75
1:A:259:SER:OG	1:A:314:ARG:NH2	2.20	0.74
1:A:804:THR:O	1:A:817:GLN:HB2	1.86	0.74
1:A:879:GLU:HG3	1:A:905:GLN:NE2	1.98	0.74
1:A:879:GLU:O	1:A:883:ARG:CG	2.30	0.74
1:A:114:ARG:HB3	1:A:125:MET:HE2	1.68	0.74
1:A:369:TYR:CB	1:A:389:HIS:NE2	2.48	0.74
1:A:479:ASP:OD1	1:A:480:HIS:N	2.21	0.74
1:A:798:LEU:HD11	1:A:837:LEU:CD1	2.17	0.74
1:A:808:ALA:HB2	1:A:816:GLU:H	1.52	0.74
1:A:920:TYR:CD2	1:A:923:VAL:CG1	2.70	0.74
1:A:498:LYS:HB3	1:A:513:LYS:HB3	1.70	0.74
1:A:550:THR:O	1:A:554:LEU:HB2	1.88	0.73
1:A:550:THR:O	1:A:554:LEU:HB3	1.87	0.73
1:A:219:THR:O	1:A:227:PHE:CZ	2.41	0.73
1:A:550:THR:CA	1:A:553:ILE:HG22	2.17	0.73
1:A:838:ILE:CA	1:A:841:LEU:CG	2.64	0.73
1:A:843:ASN:OD1	1:A:882:GLN:CB	2.37	0.73
1:A:369:TYR:HB3	1:A:389:HIS:HE2	1.49	0.73
1:A:843:ASN:OD1	1:A:844:CYS:N	2.21	0.73
1:A:369:TYR:OH	1:A:391:ARG:NE	2.22	0.73
1:A:789:TYR:HA	1:A:792:LEU:HD12	1.70	0.73
1:A:803:PHE:CD2	1:A:840:SER:HB2	2.24	0.73
1:A:842:ILE:HG22	1:A:905:GLN:OE1	1.89	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:ASN:HD21	1:A:897:LEU:HB2	1.54	0.73
1:A:788:SER:O	1:A:792:LEU:HG	1.88	0.73
1:A:80:GLU:O	1:A:514:LEU:N	2.22	0.72
1:A:112:ILE:HG13	1:A:114:ARG:HB2	1.71	0.72
1:A:279:ILE:HA	1:A:295:SER:HA	1.71	0.72
1:A:893:LYS:HE2	1:A:896:MET:HG3	1.71	0.72
1:A:972:TYR:HD1	1:A:1038:ALA:HB1	1.54	0.72
1:A:834:THR:HA	1:A:837:LEU:CG	2.20	0.72
1:A:843:ASN:HB3	1:A:905:GLN:HE21	1.51	0.72
1:A:525:VAL:HG22	1:A:568:TRP:HZ3	1.53	0.72
1:A:795:TRP:CZ3	1:A:826:LEU:HD11	2.24	0.72
1:A:803:PHE:CD2	1:A:837:LEU:HA	2.24	0.72
1:A:164:LEU:HD13	1:A:175:ILE:HG23	1.73	0.71
1:A:497:PRO:O	1:A:499:LYS:NZ	2.21	0.71
1:A:669:TYR:CE2	1:A:673:ILE:HD11	2.26	0.71
1:A:982:LEU:CD1	1:A:1020:PHE:HB2	2.17	0.71
1:A:926:TYR:OH	1:A:978:THR:CG2	2.37	0.71
1:A:563:ARG:NH1	1:A:564:GLU:OE1	2.23	0.71
1:A:114:ARG:NH2	1:A:198:MET:CE	2.53	0.71
1:A:862:ILE:HG21	1:A:869:THR:CG2	2.14	0.71
1:A:340:LYS:HG3	1:A:362:THR:HG21	1.71	0.71
1:A:218:ILE:HG12	1:A:228:LEU:HD11	1.73	0.71
1:A:428:ASN:ND2	1:A:455:ASP:O	2.21	0.71
1:A:112:ILE:HD12	1:A:114:ARG:HD3	1.72	0.70
1:A:521:ARG:HA	1:A:524:LEU:HD23	1.73	0.70
1:A:479:ASP:OD2	1:A:481:ILE:HG22	1.90	0.70
1:A:838:ILE:CA	1:A:841:LEU:HD21	2.21	0.70
1:A:976:THR:OG1	1:A:1039:LEU:HD11	1.92	0.70
1:A:899:GLU:HA	1:A:902:LYS:HD2	1.73	0.70
1:A:106:MET:HB3	1:A:503:LEU:HD11	1.74	0.70
1:A:842:ILE:C	1:A:905:GLN:OE1	2.35	0.70
1:A:111:PRO:HA	1:A:467:LEU:HD13	1.74	0.70
1:A:283:ALA:HB1	1:A:347:VAL:HG23	1.73	0.70
1:A:711:LEU:HB2	1:A:792:LEU:CD2	2.22	0.69
1:A:920:TYR:CD2	1:A:923:VAL:HG11	2.26	0.69
1:A:1039:LEU:HA	1:A:1042:TRP:HB3	1.74	0.69
1:A:256:HIS:CD2	1:A:314:ARG:HH11	2.10	0.69
1:A:873:ILE:HA	1:A:911:VAL:HG12	1.73	0.69
1:A:142:GLU:HG3	1:A:171:VAL:HG23	1.74	0.69
1:A:292:TYR:HE1	1:A:372:THR:HG21	1.54	0.69
1:A:554:LEU:CD2	1:A:569:ALA:HB2	2.20	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:838:ILE:HD13	1:A:907:ILE:HD13	1.75	0.69
1:A:839:ALA:HA	1:A:907:ILE:HD12	1.73	0.69
1:A:429:ASP:OD2	1:A:458:SER:N	2.26	0.69
1:A:805:ILE:CA	1:A:817:GLN:HG2	2.22	0.69
1:A:479:ASP:OD2	1:A:481:ILE:CG2	2.40	0.69
1:A:801:HIS:CG	1:A:841:LEU:CD1	2.71	0.69
1:A:843:ASN:CA	1:A:905:GLN:CD	2.66	0.69
1:A:96:GLN:O	1:A:100:MET:N	2.25	0.69
1:A:862:ILE:HG23	1:A:869:THR:HA	1.73	0.69
1:A:63:MET:SD	1:A:447:GLU:N	2.64	0.69
1:A:302:VAL:HG12	1:A:316:ALA:H	1.57	0.69
1:A:181:ALA:O	1:A:197:GLY:N	2.26	0.68
1:A:208:LEU:HD21	1:A:248:SER:HB3	1.75	0.68
1:A:220:SER:CA	1:A:227:PHE:CZ	2.75	0.68
1:A:821:THR:HG22	1:A:826:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:173:ILE:H	1:A:253:LYS:HZ1	1.39	0.68
1:A:219:THR:C	1:A:227:PHE:CZ	2.71	0.68
1:A:560:ALA:HA	1:A:721:LEU:HD13	1.75	0.68
1:A:674:MET:HE3	1:A:678:TRP:CE2	2.29	0.68
1:A:226:ILE:O	1:A:237:GLU:HA	1.93	0.68
1:A:346:ALA:N	1:A:359:LEU:O	2.26	0.68
1:A:539:PHE:O	1:A:543:GLN:NE2	2.25	0.68
1:A:843:ASN:N	1:A:905:GLN:OE1	2.25	0.68
1:A:527:ASN:O	1:A:529:GLY:N	2.26	0.68
1:A:227:PHE:HD2	1:A:282:ILE:HD12	1.59	0.68
1:A:374:PRO:N	1:A:382:PRO:N	2.42	0.68
1:A:966:GLN:HA	1:A:969:LEU:HD12	1.76	0.68
1:A:145:LEU:HG	1:A:216:LEU:HB3	1.75	0.68
1:A:158:GLN:OE1	1:A:160:HIS:NE2	2.27	0.68
1:A:553:ILE:HA	1:A:669:TYR:CE1	2.29	0.68
1:A:205:LEU:HB2	1:A:250:ARG:CZ	2.24	0.67
1:A:538:PHE:O	1:A:542:HIS:N	2.26	0.67
1:A:803:PHE:CE1	1:A:840:SER:CB	2.77	0.67
1:A:553:ILE:CG1	1:A:669:TYR:CD1	2.78	0.67
1:A:982:LEU:HD22	1:A:1020:PHE:CD1	2.30	0.67
1:A:165:LEU:O	1:A:176:LEU:N	2.27	0.67
1:A:237:GLU:N	1:A:254:ILE:O	2.28	0.67
1:A:371:SER:O	1:A:385:LEU:HB2	1.95	0.67
1:A:400:SER:H	1:A:404:LYS:HE2	1.60	0.67
1:A:807:VAL:HB	1:A:814:LEU:HB3	1.77	0.67
1:A:57:VAL:HG22	1:A:390:VAL:N	2.10	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:675:GLY:O	1:A:702:VAL:N	2.28	0.67
1:A:862:ILE:HD12	1:A:869:THR:O	1.95	0.67
1:A:555:ALA:HA	1:A:566:SER:HA	1.77	0.67
1:A:54:ASN:HB2	1:A:332:ARG:HB2	1.77	0.66
1:A:711:LEU:HA	1:A:714:LEU:HD12	1.75	0.66
1:A:838:ILE:CD1	1:A:907:ILE:HD13	2.25	0.66
1:A:157:PHE:CD1	1:A:161:VAL:HB	2.30	0.66
1:A:515:ARG:HE	1:A:518:ASP:CG	2.03	0.66
1:A:570:THR:HA	1:A:573:PHE:CE1	2.31	0.66
1:A:834:THR:C	1:A:837:LEU:HG	2.20	0.66
1:A:841:LEU:HD12	1:A:842:ILE:HG12	1.76	0.66
1:A:373:CYS:C	1:A:382:PRO:HA	2.21	0.66
1:A:571:ARG:HA	1:A:574:PHE:CE1	2.30	0.66
1:A:838:ILE:O	1:A:841:LEU:HD11	1.94	0.65
1:A:292:TYR:HD2	1:A:347:VAL:HG22	1.61	0.65
1:A:786:ARG:O	1:A:790:GLN:HG3	1.96	0.65
1:A:898:ARG:HD3	1:A:927:GLU:CG	2.25	0.65
1:A:806:ILE:O	1:A:809:GLU:N	2.28	0.65
1:A:870:ASP:HB2	1:A:907:ILE:HG23	1.77	0.65
1:A:203:ASP:HB2	1:A:250:ARG:NH2	2.12	0.65
1:A:213:THR:HG21	1:A:236:TYR:HE2	1.61	0.65
1:A:53:ASN:HB3	1:A:55:PRO:HD2	1.79	0.65
1:A:702:VAL:CG2	1:A:706:LEU:HB2	2.26	0.65
1:A:143:THR:N	1:A:170:PRO:HD2	2.11	0.65
1:A:515:ARG:NE	1:A:518:ASP:OD1	2.30	0.65
1:A:930:VAL:O	1:A:1035:PHE:CZ	2.49	0.65
1:A:533:GLU:O	1:A:537:ARG:HG3	1.96	0.65
1:A:676:ASN:HA	1:A:702:VAL:CG2	2.16	0.65
1:A:801:HIS:CB	1:A:841:LEU:HB3	2.10	0.65
1:A:825:ASP:OD1	1:A:830:ASP:HB2	1.97	0.65
1:A:443:LYS:NZ	1:A:446:MET:SD	2.60	0.64
1:A:845:TYR:CE2	1:A:847:ARG:O	2.49	0.64
1:A:293:THR:H	1:A:300:ILE:HD13	1.63	0.64
1:A:175:ILE:HB	1:A:206:TYR:CD2	2.32	0.64
1:A:548:CYS:O	1:A:552:LEU:HG	1.96	0.64
1:A:791:ALA:O	1:A:795:TRP:CB	2.46	0.64
1:A:898:ARG:NH2	1:A:927:GLU:CG	2.60	0.64
1:A:46:LEU:CD1	1:A:444:PRO:CB	2.70	0.64
1:A:177:GLY:C	1:A:201:LEU:HB2	2.22	0.64
1:A:703:PRO:O	1:A:705:GLN:N	2.30	0.64
1:A:843:ASN:HA	1:A:905:GLN:CD	2.22	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:179:SER:OG	1:A:199:GLN:HB2	1.97	0.64
1:A:345:ILE:HB	1:A:358:LEU:HD11	1.79	0.64
1:A:702:VAL:HG21	1:A:706:LEU:HB2	1.78	0.64
1:A:808:ALA:HA	1:A:815:GLN:HG2	1.79	0.64
1:A:834:THR:CA	1:A:837:LEU:CD2	2.61	0.64
1:A:880:LEU:CA	1:A:883:ARG:HD3	2.21	0.64
1:A:1019:HIS:O	1:A:1023:MET:CG	2.37	0.64
1:A:68:GLN:NE2	1:A:74:SER:O	2.30	0.64
1:A:806:ILE:O	1:A:808:ALA:N	2.30	0.64
1:A:463:ALA:HB3	1:A:466:GLU:HB2	1.80	0.63
1:A:106:MET:HE1	1:A:505:ALA:HA	1.79	0.63
1:A:798:LEU:CD1	1:A:837:LEU:CD1	2.75	0.63
1:A:804:THR:HB	1:A:807:VAL:CG1	2.24	0.63
1:A:862:ILE:CD1	1:A:869:THR:O	2.46	0.63
1:A:156:ILE:HA	1:A:242:ALA:HB2	1.79	0.63
1:A:227:PHE:O	1:A:228:LEU:HD22	1.97	0.63
1:A:979:LEU:HD11	1:A:1020:PHE:HE1	1.56	0.63
1:A:34:LEU:O	1:A:38:ARG:HG3	1.98	0.63
1:A:804:THR:O	1:A:807:VAL:HG13	1.97	0.63
1:A:803:PHE:CE2	1:A:840:SER:HB2	2.34	0.63
1:A:834:THR:O	1:A:838:ILE:CG2	2.45	0.63
1:A:804:THR:CB	1:A:807:VAL:CG1	2.77	0.63
1:A:114:ARG:NH1	1:A:125:MET:O	2.30	0.63
1:A:292:TYR:OH	1:A:372:THR:HG21	1.98	0.63
1:A:804:THR:O	1:A:807:VAL:CG2	2.47	0.63
1:A:431:LEU:HB2	1:A:452:ALA:HB3	1.80	0.63
1:A:842:ILE:HG22	1:A:904:TYR:O	1.96	0.63
1:A:1058:PRO:HA	1:A:1061:GLU:HB3	1.81	0.63
1:A:340:LYS:CG	1:A:362:THR:HG21	2.28	0.62
1:A:372:THR:OG1	1:A:382:PRO:CB	2.47	0.62
1:A:843:ASN:ND2	1:A:882:GLN:HB2	2.13	0.62
1:A:123:ILE:HD13	1:A:167:LEU:HD11	1.80	0.62
1:A:817:GLN:NE2	1:A:820:ILE:HG21	2.13	0.62
1:A:926:TYR:HE1	1:A:978:THR:HG21	1.64	0.62
1:A:165:LEU:N	1:A:176:LEU:O	2.31	0.62
1:A:182:ASN:ND2	1:A:195:SER:O	2.33	0.62
1:A:926:TYR:CA	1:A:1023:MET:HE2	2.26	0.62
1:A:153:LYS:HB3	1:A:240:TYR:CE1	2.35	0.62
1:A:344:GLN:N	1:A:361:VAL:O	2.31	0.62
1:A:497:PRO:HG3	1:A:515:ARG:NH2	2.14	0.62
1:A:373:CYS:SG	1:A:374:PRO:HD2	2.40	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:107:GLY:HA2	1:A:503:LEU:HD22	1.80	0.62
1:A:342:ILE:HA	1:A:362:THR:HA	1.79	0.62
1:A:54:ASN:O	1:A:57:VAL:HB	1.99	0.62
1:A:803:PHE:HD2	1:A:837:LEU:HA	1.63	0.62
1:A:1060:LEU:HD12	1:A:1063:HIS:HB3	1.82	0.62
1:A:364:ALA:HB1	1:A:417:ILE:HD12	1.82	0.61
1:A:203:ASP:C	1:A:250:ARG:HH22	2.08	0.61
1:A:294:ARG:HG3	1:A:298:GLY:HA2	1.80	0.61
1:A:844:CYS:SG	1:A:882:GLN:CB	2.84	0.61
1:A:205:LEU:HG	1:A:244:ALA:HB1	1.82	0.61
1:A:1065:VAL:O	1:A:1069:LYS:N	2.25	0.61
1:A:793:ALA:CB	1:A:857:LEU:HD11	2.30	0.61
1:A:838:ILE:HD11	1:A:907:ILE:CD1	2.30	0.61
1:A:178:LEU:N	1:A:201:LEU:HD12	2.15	0.61
1:A:41:PRO:HB2	1:A:45:GLU:CB	2.30	0.61
1:A:216:LEU:N	1:A:229:ALA:O	2.33	0.61
1:A:399:SER:H	1:A:404:LYS:HZ1	1.48	0.61
1:A:788:SER:O	1:A:792:LEU:CG	2.48	0.61
1:A:802:GLN:HA	1:A:805:ILE:HD12	1.82	0.61
1:A:803:PHE:CE2	1:A:840:SER:CB	2.84	0.61
1:A:120:ASP:OD1	1:A:120:ASP:N	2.32	0.60
1:A:525:VAL:HA	1:A:568:TRP:CH2	2.36	0.60
1:A:838:ILE:HD11	1:A:907:ILE:HD11	1.83	0.60
1:A:292:TYR:CZ	1:A:357:GLN:HB2	2.36	0.60
1:A:357:GLN:HB3	1:A:372:THR:N	2.17	0.60
1:A:934:LEU:CD1	1:A:1032:ASP:OD2	2.48	0.60
1:A:494:MET:HE3	1:A:706:LEU:HG	1.82	0.60
1:A:711:LEU:HB2	1:A:792:LEU:HD21	1.83	0.60
1:A:842:ILE:CG2	1:A:905:GLN:OE1	2.49	0.60
1:A:843:ASN:N	1:A:905:GLN:CD	2.59	0.60
1:A:900:SER:HA	1:A:904:TYR:HB2	1.81	0.60
1:A:1030:SER:HB2	1:A:1035:PHE:HB2	1.84	0.60
1:A:84:ILE:HG13	1:A:512:HIS:CD2	2.37	0.60
1:A:226:ILE:O	1:A:238:VAL:N	2.35	0.60
1:A:335:ASP:HA	1:A:338:VAL:HG22	1.84	0.60
1:A:792:LEU:O	1:A:796:LYS:CB	2.49	0.60
1:A:845:TYR:CZ	1:A:847:ARG:O	2.55	0.60
1:A:114:ARG:HD3	1:A:180:TYR:OH	2.02	0.60
1:A:465:ASP:HB3	1:A:498:LYS:HD2	1.84	0.60
1:A:806:ILE:O	1:A:807:VAL:C	2.44	0.60
1:A:920:TYR:CE2	1:A:929:VAL:HG12	2.36	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:321:ASN:HA	1:A:324:VAL:HG12	1.82	0.60
1:A:357:GLN:HB3	1:A:372:THR:HG22	1.83	0.59
1:A:440:PRO:HB3	1:A:443:LYS:HB2	1.83	0.59
1:A:524:LEU:HB3	1:A:568:TRP:HB3	1.84	0.59
1:A:676:ASN:HD22	1:A:702:VAL:CG2	2.14	0.59
1:A:306:GLY:H	1:A:312:MET:HA	1.67	0.59
1:A:926:TYR:O	1:A:930:VAL:HG23	2.03	0.59
1:A:156:ILE:HD12	1:A:241:GLN:HA	1.83	0.59
1:A:219:THR:O	1:A:227:PHE:CE2	2.55	0.59
1:A:227:PHE:CD2	1:A:282:ILE:HD12	2.37	0.59
1:A:674:MET:HE3	1:A:678:TRP:CD2	2.37	0.59
1:A:874:CYS:O	1:A:878:ASN:CG	2.46	0.59
1:A:879:GLU:CB	1:A:905:GLN:HE21	2.14	0.59
1:A:85:ARG:O	1:A:510:MET:N	2.21	0.59
1:A:97:PHE:HD1	1:A:119:ILE:HG13	1.66	0.59
1:A:43:LEU:HA	1:A:46:LEU:HB3	1.85	0.59
1:A:203:ASP:CA	1:A:250:ARG:HH22	2.16	0.59
1:A:257:SER:HA	1:A:314:ARG:CZ	2.32	0.59
1:A:40:TYR:CD1	1:A:46:LEU:HD22	2.35	0.59
1:A:158:GLN:HB3	1:A:160:HIS:CE1	2.38	0.59
1:A:221:THR:OG1	1:A:286:ASN:ND2	2.35	0.59
1:A:804:THR:CB	1:A:807:VAL:HG11	2.29	0.59
1:A:42:ASP:O	1:A:45:GLU:N	2.27	0.59
1:A:43:LEU:CD1	1:A:353:SER:HB2	2.28	0.59
1:A:219:THR:OG1	1:A:227:PHE:CE2	2.42	0.59
1:A:817:GLN:HE22	1:A:820:ILE:HG21	1.67	0.59
1:A:839:ALA:HB2	1:A:907:ILE:HG21	1.85	0.59
1:A:946:GLY:HA2	1:A:949:PHE:CG	2.38	0.59
1:A:46:LEU:HD12	1:A:444:PRO:HB3	1.83	0.59
1:A:303:TYR:HE1	1:A:314:ARG:NE	2.01	0.59
1:A:703:PRO:C	1:A:705:GLN:H	2.09	0.59
1:A:243:GLU:O	1:A:250:ARG:HG3	2.02	0.59
1:A:359:LEU:HD13	1:A:369:TYR:CZ	2.37	0.59
1:A:344:GLN:HB3	1:A:361:VAL:HB	1.84	0.58
1:A:81:ILE:HG12	1:A:511:PHE:HB3	1.85	0.58
1:A:92:GLU:HB2	1:A:134:LEU:HD11	1.85	0.58
1:A:289:ASN:HD22	1:A:305:LEU:HD12	1.68	0.58
1:A:462:SER:OG	1:A:466:GLU:OE1	2.20	0.58
1:A:524:LEU:HD12	1:A:568:TRP:HB3	1.85	0.58
1:A:213:THR:HG21	1:A:234:CYS:HB2	1.85	0.58
1:A:308:ASP:OD1	1:A:311:GLY:N	2.28	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:852:VAL:HA	1:A:855:ILE:HD12	1.85	0.58
1:A:40:TYR:CE1	1:A:46:LEU:HD23	2.39	0.58
1:A:292:TYR:CZ	1:A:372:THR:HG21	2.38	0.58
1:A:843:ASN:HB2	1:A:879:GLU:HG2	1.82	0.58
1:A:371:SER:O	1:A:385:LEU:CB	2.51	0.58
1:A:880:LEU:N	1:A:883:ARG:HG2	2.17	0.58
1:A:105:MET:HE1	1:A:216:LEU:HD22	1.86	0.58
1:A:396:PHE:HA	1:A:407:LYS:HD3	1.85	0.58
1:A:38:ARG:HG2	1:A:484:THR:HG21	1.85	0.58
1:A:205:LEU:O	1:A:250:ARG:N	2.24	0.58
1:A:227:PHE:HB2	1:A:235:LEU:HD11	1.84	0.58
1:A:880:LEU:CB	1:A:883:ARG:HD3	2.34	0.58
1:A:76:PRO:HG2	1:A:79:PRO:HG3	1.84	0.58
1:A:294:ARG:HH21	1:A:345:ILE:HG12	1.69	0.58
1:A:876:LYS:HD2	1:A:916:VAL:HG22	1.86	0.58
1:A:926:TYR:HH	1:A:978:THR:HG22	1.68	0.58
1:A:165:LEU:HB3	1:A:176:LEU:HB2	1.84	0.57
1:A:845:TYR:CD2	1:A:847:ARG:O	2.57	0.57
1:A:926:TYR:CE1	1:A:978:THR:HG21	2.39	0.57
1:A:67:LEU:HB2	1:A:451:THR:HG21	1.87	0.57
1:A:558:THR:O	1:A:562:ASP:N	2.34	0.57
1:A:570:THR:O	1:A:574:PHE:HD1	1.88	0.57
1:A:42:ASP:OD2	1:A:354:LEU:N	2.36	0.57
1:A:431:LEU:N	1:A:452:ALA:O	2.35	0.57
1:A:934:LEU:HB2	1:A:1035:PHE:CZ	2.39	0.57
1:A:571:ARG:HA	1:A:574:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:844:CYS:CB	1:A:886:GLN:HG2	2.34	0.57
1:A:525:VAL:HA	1:A:568:TRP:CZ2	2.39	0.57
1:A:920:TYR:CE1	1:A:928:GLY:HA3	2.39	0.57
1:A:63:MET:HB3	1:A:394:PRO:HG3	1.86	0.57
1:A:374:PRO:HA	1:A:383:ASN:OD1	2.04	0.57
1:A:388:VAL:HG23	1:A:389:HIS:ND1	2.18	0.57
1:A:80:GLU:HA	1:A:519:GLN:NE2	2.20	0.57
1:A:805:ILE:N	1:A:817:GLN:HG2	2.20	0.57
1:A:862:ILE:HG23	1:A:869:THR:CB	2.35	0.57
1:A:1063:HIS:O	1:A:1067:MET:HB2	2.05	0.57
1:A:842:ILE:CB	1:A:905:GLN:OE1	2.53	0.57
1:A:283:ALA:N	1:A:292:TYR:O	2.38	0.57
1:A:172:ASP:HB2	1:A:253:LYS:HZ1	1.70	0.56
1:A:838:ILE:CD1	1:A:907:ILE:CD1	2.83	0.56
1:A:357:GLN:HG3	1:A:358:LEU:HB3	1.86	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:496:PRO:HB2	1:A:499:LYS:HZ1	1.68	0.56
1:A:792:LEU:O	1:A:796:LYS:HB3	2.05	0.56
1:A:145:LEU:H	1:A:168:ALA:HB3	1.70	0.56
1:A:227:PHE:HA	1:A:237:GLU:HA	1.88	0.56
1:A:793:ALA:C	1:A:857:LEU:HD11	2.29	0.56
1:A:834:THR:O	1:A:837:LEU:CG	2.48	0.56
1:A:925:PHE:N	1:A:925:PHE:CD2	2.74	0.56
1:A:930:VAL:O	1:A:1035:PHE:HZ	1.87	0.56
1:A:54:ASN:CG	1:A:55:PRO:HD3	2.30	0.56
1:A:876:LYS:HD3	1:A:876:LYS:C	2.31	0.56
1:A:291:LEU:HB3	1:A:303:TYR:HB2	1.86	0.56
1:A:554:LEU:HD23	1:A:569:ALA:CB	2.32	0.56
1:A:124:PHE:O	1:A:134:LEU:HB2	2.06	0.56
1:A:397:SER:O	1:A:404:LYS:NZ	2.38	0.56
1:A:803:PHE:CG	1:A:840:SER:HB2	2.40	0.56
1:A:324:VAL:HG23	1:A:334:ILE:HD11	1.88	0.56
1:A:54:ASN:OD1	1:A:331:ALA:HB3	2.06	0.56
1:A:127:ASN:O	1:A:132:GLY:N	2.36	0.56
1:A:183:LEU:HG	1:A:197:GLY:HA3	1.86	0.56
1:A:553:ILE:CB	1:A:669:TYR:CE1	2.89	0.56
1:A:89:LEU:HB3	1:A:93:LEU:HD23	1.87	0.56
1:A:362:THR:HG1	1:A:363:HIS:H	1.54	0.56
1:A:478:LYS:HD2	1:A:485:ASP:O	2.06	0.56
1:A:833:LEU:O	1:A:837:LEU:CD2	2.49	0.56
1:A:54:ASN:ND2	1:A:55:PRO:HD3	2.21	0.56
1:A:114:ARG:HH12	1:A:125:MET:HB3	1.70	0.56
1:A:256:HIS:HD2	1:A:303:TYR:CE1	2.24	0.56
1:A:478:LYS:H	1:A:485:ASP:HA	1.71	0.56
1:A:781:ILE:O	1:A:785:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:788:SER:O	1:A:792:LEU:CD1	2.54	0.56
1:A:798:LEU:HD11	1:A:837:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:788:SER:O	1:A:792:LEU:HD12	2.07	0.55
1:A:68:GLN:HE22	1:A:75:VAL:HA	1.71	0.55
1:A:96:GLN:O	1:A:99:HIS:N	2.39	0.55
1:A:225:ARG:NH2	1:A:237:GLU:OE1	2.39	0.55
1:A:287:SER:HA	1:A:473:ILE:HD12	1.88	0.55
1:A:516:PRO:O	1:A:520:LEU:CB	2.54	0.55
1:A:862:ILE:HD12	1:A:869:THR:HA	1.88	0.55
1:A:92:GLU:HB2	1:A:134:LEU:HD21	1.88	0.55
1:A:292:TYR:OH	1:A:372:THR:CG2	2.54	0.55
1:A:949:PHE:CG	1:A:964:ALA:HA	2.41	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:670:PHE:HA	1:A:673:ILE:HD12	1.89	0.55
1:A:30:ILE:HG12	1:A:667:CYS:C	2.31	0.55
1:A:1039:LEU:HD12	1:A:1042:TRP:CE3	2.41	0.55
1:A:798:LEU:HD11	1:A:837:LEU:HD11	1.88	0.55
1:A:114:ARG:HH11	1:A:125:MET:C	2.14	0.55
1:A:373:CYS:H	1:A:382:PRO:HA	1.68	0.55
1:A:515:ARG:HH11	1:A:521:ARG:HH12	1.54	0.55
1:A:862:ILE:CG2	1:A:862:ILE:O	2.53	0.55
1:A:38:ARG:HA	1:A:484:THR:HG23	1.89	0.55
1:A:851:ALA:O	1:A:855:ILE:HG13	2.06	0.55
1:A:889:ASN:O	1:A:894:GLU:HB3	2.07	0.55
1:A:487:PRO:HB2	1:A:490:VAL:HG13	1.88	0.55
1:A:718:GLN:NE2	1:A:722:ASP:OD2	2.40	0.55
1:A:801:HIS:CB	1:A:841:LEU:HD22	2.34	0.55
1:A:31:ASP:HA	1:A:34:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:218:ILE:HG23	1:A:228:LEU:HD21	1.90	0.55
1:A:372:THR:OG1	1:A:382:PRO:HB2	2.06	0.55
1:A:553:ILE:HG23	1:A:554:LEU:N	2.21	0.55
1:A:35:GLN:O	1:A:38:ARG:HB2	2.07	0.54
1:A:68:GLN:NE2	1:A:76:PRO:HD3	2.22	0.54
1:A:172:ASP:HB3	1:A:208:LEU:O	2.07	0.54
1:A:838:ILE:HA	1:A:841:LEU:HG	1.84	0.54
1:A:84:ILE:HG13	1:A:512:HIS:CG	2.42	0.54
1:A:215:LEU:HB3	1:A:228:LEU:HD12	1.88	0.54
1:A:256:HIS:O	1:A:258:LYS:N	2.37	0.54
1:A:301:GLN:HB2	1:A:303:TYR:OH	2.07	0.54
1:A:880:LEU:CG	1:A:883:ARG:HH11	2.18	0.54
1:A:93:LEU:HD11	1:A:117:LEU:HD23	1.90	0.54
1:A:205:LEU:HB2	1:A:250:ARG:NH1	2.23	0.54
1:A:525:VAL:HG13	1:A:568:TRP:CH2	2.43	0.54
1:A:791:ALA:O	1:A:795:TRP:N	2.34	0.54
1:A:836:ALA:HA	1:A:875:SER:OG	2.07	0.54
1:A:1063:HIS:O	1:A:1067:MET:CB	2.56	0.54
1:A:123:ILE:HG21	1:A:165:LEU:HD21	1.89	0.54
1:A:326:ALA:O	1:A:330:ILE:HB	2.08	0.54
1:A:676:ASN:HD22	1:A:702:VAL:HG22	1.71	0.54
1:A:930:VAL:CG1	1:A:1035:PHE:CD1	2.78	0.54
1:A:40:TYR:HE1	1:A:46:LEU:HD22	1.62	0.54
1:A:714:LEU:HD13	1:A:788:SER:HB2	1.89	0.54
1:A:205:LEU:HB3	1:A:250:ARG:HB2	1.90	0.54
1:A:521:ARG:O	1:A:525:VAL:HG23	2.08	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:803:PHE:HB3	1:A:841:LEU:HD23	1.89	0.54
1:A:842:ILE:HB	1:A:905:GLN:OE1	2.07	0.54
1:A:106:MET:HG2	1:A:117:LEU:HB2	1.88	0.54
1:A:407:LYS:HE3	1:A:409:HIS:NE2	2.23	0.54
1:A:926:TYR:O	1:A:930:VAL:CG2	2.55	0.54
1:A:220:SER:CA	1:A:227:PHE:HZ	2.21	0.54
1:A:373:CYS:O	1:A:382:PRO:CA	2.56	0.54
1:A:1030:SER:CB	1:A:1035:PHE:HB2	2.37	0.54
1:A:431:LEU:HD13	1:A:502:LEU:HD22	1.88	0.54
1:A:459:TRP:HB2	1:A:503:LEU:HD21	1.90	0.54
1:A:801:HIS:CB	1:A:841:LEU:CG	2.86	0.54
1:A:930:VAL:CG1	1:A:1035:PHE:HE1	2.10	0.54
1:A:78:LEU:HG	1:A:523:LEU:HD11	1.90	0.53
1:A:219:THR:C	1:A:227:PHE:CE2	2.86	0.53
1:A:883:ARG:O	1:A:887:VAL:O	2.26	0.53
1:A:369:TYR:HB3	1:A:389:HIS:CD2	2.33	0.53
1:A:703:PRO:C	1:A:705:GLN:N	2.62	0.53
1:A:817:GLN:NE2	1:A:820:ILE:CG2	2.72	0.53
1:A:862:ILE:HG23	1:A:869:THR:CA	2.38	0.53
1:A:880:LEU:O	1:A:883:ARG:HG3	2.07	0.53
1:A:1061:GLU:O	1:A:1065:VAL:HG12	2.07	0.53
1:A:206:TYR:HE1	1:A:241:GLN:H	1.56	0.53
1:A:344:GLN:O	1:A:361:VAL:N	2.27	0.53
1:A:292:TYR:CE1	1:A:372:THR:CG2	2.90	0.53
1:A:767:PHE:O	1:A:771:GLN:HG2	2.08	0.53
1:A:121:SER:HA	1:A:143:THR:HA	1.90	0.53
1:A:290:ILE:HD12	1:A:382:PRO:HG3	1.90	0.53
1:A:533:GLU:HB3	1:A:536:GLU:HB2	1.91	0.53
1:A:679:ASP:C	1:A:702:VAL:N	2.67	0.53
1:A:711:LEU:O	1:A:715:LYS:NZ	2.35	0.53
1:A:898:ARG:HB3	1:A:902:LYS:HZ1	1.73	0.53
1:A:902:LYS:HZ2	1:A:931:GLU:HG3	1.74	0.53
1:A:437:ASP:HB3	1:A:440:PRO:HB2	1.90	0.53
1:A:504:SER:N	1:A:507:GLY:O	2.32	0.53
1:A:979:LEU:CD1	1:A:1020:PHE:HD1	2.16	0.53
1:A:112:ILE:HG13	1:A:114:ARG:H	1.73	0.53
1:A:162:ARG:HG3	1:A:163:HIS:ND1	2.23	0.53
1:A:241:GLN:NE2	1:A:243:GLU:HG3	2.23	0.53
1:A:678:TRP:HH2	1:A:828:ILE:HG12	1.73	0.53
1:A:176:LEU:HA	1:A:203:ASP:OD1	2.08	0.53
1:A:493:HIS:NE2	1:A:517:VAL:HG11	2.24	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:843:ASN:ND2	1:A:879:GLU:CA	2.38	0.53
1:A:292:TYR:CD2	1:A:347:VAL:HG22	2.43	0.52
1:A:373:CYS:O	1:A:382:PRO:C	2.52	0.52
1:A:972:TYR:CD1	1:A:1039:LEU:HD22	2.43	0.52
1:A:105:MET:HB2	1:A:118:THR:HB	1.92	0.52
1:A:148:GLY:HA3	1:A:218:ILE:HG21	1.91	0.52
1:A:58:SER:OG	1:A:62:ASP:OD2	2.23	0.52
1:A:123:ILE:O	1:A:137:PHE:N	2.41	0.52
1:A:327:ALA:O	1:A:330:ILE:HG22	2.09	0.52
1:A:442:GLN:OE1	1:A:442:GLN:N	2.35	0.52
1:A:894:GLU:CD	1:A:898:ARG:HH12	2.17	0.52
1:A:979:LEU:HD13	1:A:1020:PHE:CD1	2.42	0.52
1:A:345:ILE:HA	1:A:360:ALA:HA	1.90	0.52
1:A:524:LEU:HD22	1:A:538:PHE:CE2	2.44	0.52
1:A:1039:LEU:O	1:A:1042:TRP:HE3	1.91	0.52
1:A:56:THR:HB	1:A:389:HIS:HB3	1.92	0.52
1:A:570:THR:HA	1:A:573:PHE:CD1	2.44	0.52
1:A:220:SER:OG	1:A:225:ARG:O	2.27	0.52
1:A:233:GLY:N	1:A:277:ASP:O	2.42	0.52
1:A:549:ALA:O	1:A:553:ILE:CG2	2.54	0.52
1:A:90:PRO:HG2	1:A:126:TRP:CD2	2.45	0.52
1:A:838:ILE:O	1:A:842:ILE:CG1	2.45	0.52
1:A:57:VAL:HG13	1:A:390:VAL:C	2.30	0.52
1:A:301:GLN:HB2	1:A:303:TYR:CZ	2.44	0.52
1:A:881:LEU:CD2	1:A:882:GLN:NE2	2.73	0.52
1:A:54:ASN:HB3	1:A:330:ILE:O	2.10	0.52
1:A:124:PHE:HA	1:A:136:TYR:HA	1.92	0.52
1:A:574:PHE:HD2	1:A:770:ALA:O	1.93	0.52
1:A:798:LEU:CD1	1:A:837:LEU:HD11	2.40	0.52
1:A:833:LEU:C	1:A:837:LEU:HD23	2.34	0.52
1:A:890:LYS:HD3	1:A:925:PHE:CZ	2.44	0.52
1:A:43:LEU:HD11	1:A:353:SER:CB	2.31	0.51
1:A:281:GLN:HB2	1:A:294:ARG:NH2	2.25	0.51
1:A:351:SER:O	1:A:482:PRO:HA	2.10	0.51
1:A:804:THR:O	1:A:807:VAL:CG1	2.59	0.51
1:A:824:LYS:HD2	1:A:829:ARG:HG3	1.93	0.51
1:A:946:GLY:HA2	1:A:949:PHE:CD2	2.44	0.51
1:A:373:CYS:CA	1:A:382:PRO:CA	2.82	0.51
1:A:43:LEU:HD21	1:A:352:GLU:O	2.10	0.51
1:A:255:ASN:OD1	1:A:256:HIS:N	2.43	0.51
1:A:258:LYS:C	1:A:314:ARG:HD2	2.35	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:308:ASP:CG	1:A:311:GLY:H	2.17	0.51
1:A:341:PRO:C	1:A:362:THR:HG1	2.16	0.51
1:A:511:PHE:O	1:A:512:HIS:HD2	1.93	0.51
1:A:521:ARG:O	1:A:524:LEU:HB2	2.10	0.51
1:A:542:HIS:HB3	1:A:547:ALA:N	2.25	0.51
1:A:41:PRO:CB	1:A:45:GLU:HB3	2.38	0.51
1:A:109:PHE:HB3	1:A:149:LEU:HD22	1.92	0.51
1:A:435:ASN:CG	1:A:436:HIS:H	2.19	0.51
1:A:152:PRO:HB2	1:A:157:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:179:SER:OG	1:A:199:GLN:CB	2.59	0.51
1:A:880:LEU:C	1:A:883:ARG:HG3	2.36	0.51
1:A:881:LEU:CD2	1:A:882:GLN:HE21	2.23	0.51
1:A:65:TYR:CE2	1:A:67:LEU:HB3	2.46	0.51
1:A:116:TRP:HB3	1:A:125:MET:HE3	1.92	0.51
1:A:151:LYS:HE2	1:A:471:LYS:HA	1.92	0.51
1:A:294:ARG:NH2	1:A:345:ILE:HG12	2.25	0.51
1:A:669:TYR:CZ	1:A:673:ILE:HD11	2.45	0.51
1:A:838:ILE:CA	1:A:841:LEU:HG	2.40	0.51
1:A:898:ARG:HH21	1:A:927:GLU:CG	2.23	0.51
1:A:947:LEU:HD22	1:A:948:HIS:CD2	2.46	0.51
1:A:166:VAL:HA	1:A:174:VAL:O	2.10	0.50
1:A:114:ARG:CD	1:A:180:TYR:OH	2.59	0.50
1:A:459:TRP:HB2	1:A:503:LEU:CD2	2.42	0.50
1:A:553:ILE:CB	1:A:669:TYR:HD1	2.16	0.50
1:A:574:PHE:HD2	1:A:770:ALA:C	2.20	0.50
1:A:894:GLU:HG3	1:A:895:ARG:H	1.75	0.50
1:A:677:ILE:HG13	1:A:707:LEU:HD12	1.93	0.50
1:A:857:LEU:O	1:A:861:ASP:N	2.44	0.50
1:A:900:SER:O	1:A:905:GLN:N	2.25	0.50
1:A:934:LEU:HB2	1:A:1035:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:289:ASN:HB3	1:A:305:LEU:HB2	1.94	0.50
1:A:439:PHE:HB2	1:A:440:PRO:HD3	1.94	0.50
1:A:806:ILE:HG22	1:A:809:GLU:CB	2.27	0.50
1:A:873:ILE:HG13	1:A:874:CYS:H	1.77	0.50
1:A:487:PRO:O	1:A:490:VAL:HG22	2.12	0.50
1:A:887:VAL:HG21	1:A:896:MET:HE1	1.93	0.50
1:A:469:VAL:HG12	1:A:472:ILE:HD11	1.93	0.50
1:A:492:GLN:HB2	1:A:515:ARG:HD2	1.93	0.50
1:A:845:TYR:CD2	1:A:848:ASP:OD1	2.65	0.50
1:A:30:ILE:HD12	1:A:33:GLN:HB3	1.92	0.50
1:A:41:PRO:CG	1:A:45:GLU:CG	2.80	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:51:ALA:HB3	1:A:56:THR:HG23	1.93	0.50
1:A:64:ASP:OD1	1:A:65:TYR:N	2.45	0.50
1:A:180:TYR:CE1	1:A:198:MET:HB2	2.46	0.50
1:A:56:THR:OG1	1:A:388:VAL:O	2.28	0.49
1:A:797:LEU:HD21	1:A:801:HIS:CE1	2.35	0.49
1:A:803:PHE:CZ	1:A:840:SER:OG	2.63	0.49
1:A:845:TYR:O	1:A:846:ILE:C	2.55	0.49
1:A:889:ASN:OD1	1:A:894:GLU:O	2.30	0.49
1:A:278:PRO:HB2	1:A:296:GLU:HB3	1.94	0.49
1:A:837:LEU:O	1:A:841:LEU:CD2	2.60	0.49
1:A:1063:HIS:C	1:A:1063:HIS:CD2	2.90	0.49
1:A:469:VAL:HB	1:A:474:THR:O	2.12	0.49
1:A:843:ASN:CA	1:A:905:GLN:NE2	2.75	0.49
1:A:968:ARG:HG2	1:A:1034:LEU:HD11	1.93	0.49
1:A:57:VAL:HG22	1:A:390:VAL:HB	1.95	0.49
1:A:457:HIS:HB2	1:A:505:ALA:HB2	1.93	0.49
1:A:893:LYS:HB3	1:A:896:MET:HB3	1.93	0.49
1:A:965:PHE:HB3	1:A:969:LEU:HD11	1.94	0.49
1:A:478:LYS:HE2	1:A:488:VAL:HA	1.93	0.49
1:A:803:PHE:CZ	1:A:840:SER:HB3	2.41	0.49
1:A:972:TYR:CZ	1:A:1042:TRP:HB2	2.48	0.49
1:A:489:VAL:O	1:A:672:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:497:PRO:HG3	1:A:515:ARG:NE	2.26	0.49
1:A:556:CYS:SG	1:A:557:SER:N	2.85	0.49
1:A:877:ALA:CA	1:A:919:GLN:HG2	2.34	0.49
1:A:367:ARG:HD2	1:A:369:TYR:OH	2.13	0.49
1:A:369:TYR:HH	1:A:391:ARG:HE	1.53	0.49
1:A:896:MET:SD	1:A:897:LEU:HD22	2.52	0.49
1:A:281:GLN:CD	1:A:294:ARG:HH12	2.21	0.49
1:A:301:GLN:HA	1:A:317:SER:HA	1.95	0.49
1:A:438:THR:OG1	1:A:439:PHE:N	2.46	0.49
1:A:976:THR:HA	1:A:1039:LEU:HD11	1.95	0.49
1:A:840:SER:O	1:A:843:ASN:OD1	2.31	0.49
1:A:172:ASP:OD2	1:A:208:LEU:N	2.46	0.49
1:A:205:LEU:C	1:A:250:ARG:HB3	2.38	0.49
1:A:169:THR:HG1	1:A:172:ASP:H	1.60	0.48
1:A:284:ILE:O	1:A:347:VAL:HG21	2.13	0.48
1:A:400:SER:HB3	1:A:404:LYS:HE2	1.95	0.48
1:A:768:HIS:O	1:A:771:GLN:HG2	2.13	0.48
1:A:65:TYR:HB2	1:A:394:PRO:HB2	1.94	0.48
1:A:85:ARG:C	1:A:510:MET:HE2	2.39	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:708:GLU:OE1	1:A:712:GLN:NE2	2.43	0.48
1:A:833:LEU:HD12	1:A:833:LEU:H	1.78	0.48
1:A:925:PHE:H	1:A:925:PHE:HD2	1.60	0.48
1:A:348:ILE:N	1:A:358:LEU:HA	2.28	0.48
1:A:678:TRP:HA	1:A:824:LYS:HB2	1.95	0.48
1:A:979:LEU:HD13	1:A:1020:PHE:HD1	1.76	0.48
1:A:25:ASN:HD21	1:A:28:ARG:HH11	1.61	0.48
1:A:30:ILE:HB	1:A:667:CYS:HB3	1.95	0.48
1:A:217:THR:N	1:A:229:ALA:O	2.35	0.48
1:A:399:SER:N	1:A:404:LYS:HZ1	2.10	0.48
1:A:484:THR:C	1:A:487:PRO:HD2	2.38	0.48
1:A:880:LEU:HD13	1:A:919:GLN:HG3	1.95	0.48
1:A:29:LEU:HD21	1:A:659:TYR:OH	2.14	0.48
1:A:368:LEU:HA	1:A:390:VAL:HG22	1.95	0.48
1:A:845:TYR:CE2	1:A:848:ASP:OD1	2.67	0.48
1:A:920:TYR:CE2	1:A:923:VAL:HG13	2.46	0.48
1:A:563:ARG:HB2	1:A:728:ALA:HB1	1.95	0.48
1:A:837:LEU:O	1:A:841:LEU:CG	2.57	0.48
1:A:843:ASN:OD1	1:A:882:GLN:HB3	2.12	0.48
1:A:845:TYR:OH	1:A:849:ASN:N	2.47	0.48
1:A:857:LEU:O	1:A:861:ASP:CB	2.55	0.48
1:A:40:TYR:HE1	1:A:46:LEU:CD2	2.16	0.48
1:A:54:ASN:HB3	1:A:330:ILE:HG23	1.96	0.48
1:A:151:LYS:HD2	1:A:222:ASP:HA	1.96	0.48
1:A:157:PHE:HB2	1:A:161:VAL:HG21	1.96	0.48
1:A:340:LYS:CD	1:A:362:THR:HG21	2.43	0.48
1:A:372:THR:HG23	1:A:372:THR:O	2.13	0.48
1:A:439:PHE:CG	1:A:541:LEU:O	2.67	0.48
1:A:257:SER:HA	1:A:314:ARG:NH2	2.29	0.48
1:A:503:LEU:HD12	1:A:507:GLY:O	2.14	0.48
1:A:1033:GLU:OE1	1:A:1037:ILE:HB	2.14	0.48
1:A:78:LEU:N	1:A:79:PRO:HD3	2.28	0.47
1:A:669:TYR:CE2	1:A:673:ILE:CD1	2.96	0.47
1:A:793:ALA:HB1	1:A:857:LEU:HD11	1.96	0.47
1:A:803:PHE:HD2	1:A:837:LEU:CA	2.27	0.47
1:A:90:PRO:HB2	1:A:93:LEU:HB3	1.96	0.47
1:A:156:ILE:HG23	1:A:242:ALA:N	2.28	0.47
1:A:427:ASP:HA	1:A:457:HIS:NE2	2.29	0.47
1:A:702:VAL:HG21	1:A:706:LEU:HD22	1.96	0.47
1:A:879:GLU:OE2	1:A:883:ARG:HD2	2.12	0.47
1:A:882:GLN:O	1:A:886:GLN:HB2	2.13	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:ASN:CG	1:A:894:GLU:HA	2.39	0.47
1:A:895:ARG:CD	1:A:898:ARG:HH11	2.28	0.47
1:A:285:ASP:HB2	1:A:292:TYR:CE2	2.49	0.47
1:A:340:LYS:HZ2	1:A:366:VAL:HG11	1.80	0.47
1:A:844:CYS:SG	1:A:882:GLN:CG	3.02	0.47
1:A:880:LEU:HG	1:A:883:ARG:NH1	2.21	0.47
1:A:64:ASP:HB3	1:A:449:GLN:OE1	2.13	0.47
1:A:220:SER:N	1:A:227:PHE:CZ	2.82	0.47
1:A:461:LEU:HD13	1:A:502:LEU:HG	1.96	0.47
1:A:516:PRO:O	1:A:520:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:710:VAL:HA	1:A:713:GLU:HG2	1.95	0.47
1:A:407:LYS:HB2	1:A:409:HIS:NE2	2.29	0.47
1:A:28:ARG:HD2	1:A:29:LEU:N	2.29	0.47
1:A:320:GLN:HA	1:A:323:ILE:HD13	1.96	0.47
1:A:460:ALA:N	1:A:503:LEU:HD23	2.30	0.47
1:A:785:VAL:O	1:A:788:SER:OG	2.21	0.47
1:A:876:LYS:HZ3	1:A:919:GLN:HB3	1.79	0.47
1:A:26:ALA:HA	1:A:29:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:70:PRO:HB3	1:A:453:GLY:O	2.14	0.47
1:A:114:ARG:NH1	1:A:125:MET:CB	2.76	0.47
1:A:124:PHE:HA	1:A:135:ALA:O	2.14	0.47
1:A:206:TYR:OH	1:A:241:GLN:N	2.48	0.47
1:A:300:ILE:HG23	1:A:318:VAL:HB	1.96	0.47
1:A:340:LYS:HD2	1:A:362:THR:HG21	1.97	0.47
1:A:845:TYR:HE2	1:A:848:ASP:HA	1.68	0.47
1:A:879:GLU:HG3	1:A:905:GLN:CG	2.45	0.47
1:A:920:TYR:CD2	1:A:923:VAL:HG12	2.49	0.47
1:A:934:LEU:HD12	1:A:1032:ASP:OD2	2.14	0.47
1:A:972:TYR:HD1	1:A:1038:ALA:CB	2.26	0.47
1:A:213:THR:HG21	1:A:236:TYR:CE2	2.46	0.47
1:A:356:CYS:HA	1:A:371:SER:HB2	1.97	0.47
1:A:516:PRO:O	1:A:520:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:839:ALA:HB2	1:A:907:ILE:CG2	2.45	0.47
1:A:948:HIS:HA	1:A:951:LYS:CB	2.41	0.47
1:A:55:PRO:O	1:A:57:VAL:O	2.33	0.47
1:A:106:MET:HB3	1:A:503:LEU:CD1	2.44	0.47
1:A:218:ILE:HG12	1:A:228:LEU:HD21	1.97	0.47
1:A:498:LYS:O	1:A:513:LYS:N	2.48	0.47
1:A:515:ARG:HB2	1:A:518:ASP:CG	2.40	0.47
1:A:85:ARG:HE	1:A:85:ARG:HB2	1.38	0.46
1:A:227:PHE:N	1:A:227:PHE:CD1	2.82	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:375:PHE:HD1	1:A:383:ASN:OD1	1.98	0.46
1:A:803:PHE:CD1	1:A:840:SER:HB3	2.50	0.46
1:A:806:ILE:C	1:A:808:ALA:N	2.73	0.46
1:A:1026:LEU:O	1:A:1029:ARG:N	2.48	0.46
1:A:207:SER:N	1:A:251:CYS:HB3	2.30	0.46
1:A:285:ASP:HA	1:A:349:GLU:OE2	2.14	0.46
1:A:674:MET:HE3	1:A:678:TRP:CZ2	2.50	0.46
1:A:824:LYS:HE3	1:A:824:LYS:O	2.15	0.46
1:A:880:LEU:C	1:A:883:ARG:CG	2.86	0.46
1:A:888:GLN:O	1:A:892:GLU:O	2.33	0.46
1:A:114:ARG:CD	1:A:180:TYR:CE1	2.94	0.46
1:A:845:TYR:CE1	1:A:847:ARG:O	2.68	0.46
1:A:876:LYS:HZ3	1:A:916:VAL:HA	1.80	0.46
1:A:90:PRO:HG2	1:A:126:TRP:CE3	2.50	0.46
1:A:277:ASP:OD1	1:A:277:ASP:N	2.48	0.46
1:A:296:GLU:OE1	1:A:296:GLU:N	2.46	0.46
1:A:320:GLN:HG2	1:A:342:ILE:HD11	1.98	0.46
1:A:492:GLN:HG3	1:A:493:HIS:CD2	2.51	0.46
1:A:794:LEU:N	1:A:857:LEU:HD11	2.31	0.46
1:A:816:GLU:HB3	1:A:819:LYS:HE2	1.96	0.46
1:A:60:MET:HG3	1:A:414:SER:HA	1.98	0.46
1:A:93:LEU:HD22	1:A:126:TRP:CZ2	2.50	0.46
1:A:158:GLN:O	1:A:161:VAL:HG23	2.15	0.46
1:A:493:HIS:CE1	1:A:517:VAL:HG21	2.50	0.46
1:A:501:VAL:HG23	1:A:510:MET:SD	2.56	0.46
1:A:551:CYS:CB	1:A:573:PHE:HB3	2.45	0.46
1:A:80:GLU:OE2	1:A:513:LYS:HE2	2.14	0.46
1:A:338:VAL:HA	1:A:339:PHE:HA	1.62	0.46
1:A:782:GLN:HE21	1:A:786:ARG:HH22	1.62	0.46
1:A:880:LEU:CA	1:A:883:ARG:HG3	2.25	0.46
1:A:80:GLU:HB2	1:A:448:THR:HB	1.98	0.46
1:A:142:GLU:C	1:A:170:PRO:HD2	2.41	0.46
1:A:283:ALA:O	1:A:291:LEU:HD12	2.16	0.46
1:A:332:ARG:CZ	1:A:412:LEU:HD11	2.45	0.46
1:A:340:LYS:HG3	1:A:362:THR:CG2	2.44	0.46
1:A:367:ARG:HB3	1:A:369:TYR:CE2	2.51	0.46
1:A:1033:GLU:O	1:A:1033:GLU:CD	2.59	0.46
1:A:670:PHE:CD1	1:A:784:LEU:HD21	2.50	0.46
1:A:162:ARG:HG3	1:A:163:HIS:CE1	2.51	0.46
1:A:177:GLY:O	1:A:201:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:415:LYS:HG3	1:A:416:GLY:H	1.81	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:301:GLN:OE1	1:A:301:GLN:N	2.49	0.45
1:A:524:LEU:HD22	1:A:538:PHE:CZ	2.51	0.45
1:A:536:GLU:N	1:A:536:GLU:OE1	2.49	0.45
1:A:830:ASP:O	1:A:834:THR:OG1	2.28	0.45
1:A:43:LEU:C	1:A:45:GLU:N	2.67	0.45
1:A:236:TYR:CD1	1:A:255:ASN:HB2	2.51	0.45
1:A:704:CYS:HB3	1:A:822:THR:HA	1.97	0.45
1:A:841:LEU:HG	1:A:841:LEU:H	1.51	0.45
1:A:920:TYR:CD1	1:A:923:VAL:HG11	2.51	0.45
1:A:343:VAL:HG22	1:A:362:THR:C	2.41	0.45
1:A:357:GLN:HB2	1:A:372:THR:CG2	2.42	0.45
1:A:889:ASN:OD1	1:A:894:GLU:CA	2.61	0.45
1:A:1042:TRP:CZ3	1:A:1043:LEU:HB3	2.51	0.45
1:A:574:PHE:CD2	1:A:774:GLU:HB2	2.51	0.45
1:A:179:SER:HG	1:A:199:GLN:HB2	1.81	0.45
1:A:205:LEU:O	1:A:249:GLN:HB3	2.17	0.45
1:A:216:LEU:H	1:A:230:GLY:HA2	1.82	0.45
1:A:488:VAL:HG11	1:A:513:LYS:NZ	2.31	0.45
1:A:498:LYS:CB	1:A:513:LYS:HD2	2.46	0.45
1:A:662:LYS:H	1:A:662:LYS:HD2	1.81	0.45
1:A:917:CYS:SG	1:A:918:ALA:N	2.89	0.45
1:A:34:LEU:HD11	1:A:671:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:122:ASP:OD1	1:A:140:LEU:N	2.48	0.45
1:A:778:LEU:HD12	1:A:781:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:31:ASP:OD2	1:A:35:GLN:NE2	2.50	0.45
1:A:61:SER:HB2	1:A:410:ARG:HA	1.99	0.45
1:A:93:LEU:HD13	1:A:126:TRP:CH2	2.52	0.45
1:A:172:ASP:OD2	1:A:207:SER:HB3	2.16	0.45
1:A:362:THR:HG1	1:A:363:HIS:N	2.14	0.45
1:A:400:SER:N	1:A:404:LYS:HE2	2.30	0.45
1:A:521:ARG:HB3	1:A:554:LEU:CD1	2.40	0.45
1:A:107:GLY:HA3	1:A:116:TRP:CZ2	2.52	0.45
1:A:145:LEU:N	1:A:168:ALA:HB3	2.32	0.45
1:A:310:GLN:N	1:A:310:GLN:OE1	2.49	0.45
1:A:500:PHE:N	1:A:511:PHE:O	2.28	0.45
1:A:838:ILE:CG1	1:A:841:LEU:HD11	2.47	0.45
1:A:902:LYS:NZ	1:A:931:GLU:CG	2.80	0.45
1:A:948:HIS:NE2	1:A:951:LYS:HG3	2.32	0.45
1:A:373:CYS:SG	1:A:374:PRO:CD	3.05	0.45
1:A:802:GLN:O	1:A:802:GLN:HG2	2.17	0.45
1:A:876:LYS:HD3	1:A:877:ALA:N	2.32	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:28:ARG:O	1:A:32:ARG:HG3	2.16	0.45
1:A:112:ILE:CG1	1:A:114:ARG:HB2	2.43	0.45
1:A:175:ILE:HD13	1:A:206:TYR:CD1	2.52	0.45
1:A:228:LEU:O	1:A:236:TYR:N	2.45	0.45
1:A:437:ASP:HB2	1:A:446:MET:O	2.17	0.45
1:A:38:ARG:HG2	1:A:484:THR:CG2	2.45	0.44
1:A:81:ILE:HG13	1:A:513:LYS:HA	1.98	0.44
1:A:103:ASN:ND2	1:A:143:THR:HB	2.31	0.44
1:A:332:ARG:NE	1:A:412:LEU:HD21	2.31	0.44
1:A:533:GLU:O	1:A:537:ARG:HB2	2.16	0.44
1:A:1064:LEU:O	1:A:1068:ALA:N	2.44	0.44
1:A:30:ILE:HG12	1:A:667:CYS:O	2.17	0.44
1:A:221:THR:OG1	1:A:222:ASP:N	2.50	0.44
1:A:391:ARG:NH2	1:A:447:GLU:HG2	2.20	0.44
1:A:797:LEU:O	1:A:801:HIS:CG	2.71	0.44
1:A:917:CYS:O	1:A:921:ARG:HG2	2.18	0.44
1:A:25:ASN:OD1	1:A:28:ARG:NH1	2.50	0.44
1:A:203:ASP:OD1	1:A:203:ASP:N	2.49	0.44
1:A:292:TYR:HB2	1:A:358:LEU:HD13	1.99	0.44
1:A:976:THR:OG1	1:A:1039:LEU:CD1	2.63	0.44
1:A:1026:LEU:O	1:A:1027:SER:C	2.59	0.44
1:A:1057:SER:O	1:A:1059:PHE:N	2.50	0.44
1:A:1062:PRO:O	1:A:1063:HIS:C	2.61	0.44
1:A:43:LEU:CD1	1:A:353:SER:CB	2.94	0.44
1:A:350:ASN:ND2	1:A:354:LEU:O	2.50	0.44
1:A:496:PRO:HB2	1:A:499:LYS:NZ	2.30	0.44
1:A:500:PHE:HB3	1:A:502:LEU:CD1	2.47	0.44
1:A:514:LEU:HD23	1:A:514:LEU:HA	1.82	0.44
1:A:45:GLU:C	1:A:48:MET:H	2.24	0.44
1:A:90:PRO:O	1:A:94:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:149:LEU:HD11	1:A:163:HIS:CD2	2.53	0.44
1:A:203:ASP:HB2	1:A:250:ARG:HH22	1.81	0.44
1:A:250:ARG:O	1:A:250:ARG:HG2	2.17	0.44
1:A:323:ILE:HG12	1:A:370:PHE:CZ	2.52	0.44
1:A:479:ASP:OD2	1:A:481:ILE:HG23	2.16	0.44
1:A:969:LEU:O	1:A:973:LYS:CB	2.65	0.44
1:A:1057:SER:O	1:A:1057:SER:OG	2.35	0.44
1:A:295:SER:C	1:A:298:GLY:H	2.26	0.44
1:A:301:GLN:HG3	1:A:317:SER:HB2	1.99	0.44
1:A:343:VAL:H	1:A:362:THR:HA	1.82	0.44
1:A:433:CYS:N	1:A:450:MET:SD	2.80	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:560:ALA:HB1	1:A:721:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:823:PHE:HD1	1:A:823:PHE:HA	1.73	0.44
1:A:169:THR:N	1:A:172:ASP:O	2.50	0.44
1:A:834:THR:HG23	1:A:837:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:845:TYR:CG	1:A:847:ARG:O	2.71	0.44
1:A:229:ALA:HA	1:A:234:CYS:O	2.18	0.44
1:A:236:TYR:HA	1:A:255:ASN:HA	1.99	0.44
1:A:292:TYR:HE1	1:A:372:THR:CG2	2.28	0.44
1:A:844:CYS:SG	1:A:886:GLN:CG	3.01	0.44
1:A:1042:TRP:CE3	1:A:1043:LEU:HB3	2.53	0.44
1:A:225:ARG:HH21	1:A:237:GLU:CD	2.26	0.44
1:A:404:LYS:O	1:A:405:PRO:C	2.60	0.44
1:A:702:VAL:HB	1:A:703:PRO:HD2	1.99	0.44
1:A:902:LYS:NZ	1:A:931:GLU:HG3	2.32	0.44
1:A:47:LEU:O	1:A:48:MET:C	2.58	0.43
1:A:134:LEU:HD23	1:A:134:LEU:H	1.83	0.43
1:A:137:PHE:CD2	1:A:140:LEU:CD1	2.95	0.43
1:A:789:TYR:CA	1:A:792:LEU:HD12	2.45	0.43
1:A:332:ARG:NH2	1:A:412:LEU:HD11	2.32	0.43
1:A:714:LEU:O	1:A:717:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:111:PRO:HD2	1:A:149:LEU:HD23	1.99	0.43
1:A:308:ASP:OD1	1:A:310:GLN:N	2.50	0.43
1:A:372:THR:HG1	1:A:382:PRO:CB	2.31	0.43
1:A:553:ILE:CA	1:A:669:TYR:CE1	3.00	0.43
1:A:967:GLU:HA	1:A:970:ASN:HD21	1.83	0.43
1:A:972:TYR:CE1	1:A:1042:TRP:HB2	2.53	0.43
1:A:297:LYS:HB2	1:A:299:VAL:HG23	1.99	0.43
1:A:354:LEU:HG	1:A:355:ASP:OD1	2.18	0.43
1:A:1040:TYR:O	1:A:1043:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:97:PHE:HA	1:A:100:MET:HB3	1.99	0.43
1:A:112:ILE:HG23	1:A:149:LEU:HD21	2.01	0.43
1:A:323:ILE:HG23	1:A:387:LEU:HD13	2.00	0.43
1:A:909:ASN:O	1:A:911:VAL:HG22	2.18	0.43
1:A:934:LEU:O	1:A:938:GLU:HG3	2.18	0.43
1:A:216:LEU:O	1:A:218:ILE:HG13	2.19	0.43
1:A:245:GLY:H	1:A:250:ARG:HB2	1.83	0.43
1:A:341:PRO:HD2	1:A:363:HIS:HB3	2.00	0.43
1:A:787:LYS:O	1:A:791:ALA:CB	2.66	0.43
1:A:801:HIS:CB	1:A:841:LEU:CD2	2.96	0.43
1:A:245:GLY:HA3	1:A:249:GLN:HA	2.00	0.43
1:A:797:LEU:CG	1:A:801:HIS:NE2	2.70	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:ILE:C	1:A:817:GLN:HB3	2.42	0.43
1:A:59:GLY:HA2	1:A:392:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:60:MET:SD	1:A:414:SER:HA	2.58	0.43
1:A:105:MET:O	1:A:118:THR:N	2.30	0.43
1:A:256:HIS:O	1:A:314:ARG:NE	2.52	0.43
1:A:428:ASN:HD22	1:A:455:ASP:C	2.21	0.43
1:A:821:THR:HG22	1:A:826:LEU:CD1	2.47	0.43
1:A:840:SER:CA	1:A:843:ASN:ND2	2.76	0.43
1:A:901:LEU:HD11	1:A:932:LEU:HD13	1.99	0.43
1:A:105:MET:HB2	1:A:118:THR:CB	2.48	0.43
1:A:334:ILE:O	1:A:337:SER:N	2.52	0.43
1:A:976:THR:CA	1:A:1039:LEU:HD11	2.49	0.43
1:A:62:ASP:OD1	1:A:62:ASP:N	2.35	0.43
1:A:533:GLU:O	1:A:537:ARG:CB	2.67	0.43
1:A:715:LYS:NZ	1:A:792:LEU:HD22	2.34	0.43
1:A:844:CYS:HA	1:A:886:GLN:HG2	2.01	0.43
1:A:894:GLU:HG3	1:A:895:ARG:N	2.34	0.43
1:A:1042:TRP:O	1:A:1046:VAL:HG12	2.19	0.43
1:A:172:ASP:HB2	1:A:253:LYS:NZ	2.33	0.42
1:A:544:GLU:HA	1:A:547:ALA:HB3	2.01	0.42
1:A:845:TYR:O	1:A:845:TYR:CG	2.72	0.42
1:A:943:GLN:O	1:A:945:LEU:HD12	2.19	0.42
1:A:947:LEU:HD22	1:A:948:HIS:HD2	1.84	0.42
1:A:971:SER:O	1:A:975:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:125:MET:O	1:A:135:ALA:N	2.45	0.42
1:A:369:TYR:HE2	1:A:391:ARG:HB2	1.84	0.42
1:A:674:MET:CE	1:A:678:TRP:CZ2	3.02	0.42
1:A:771:GLN:O	1:A:775:LYS:N	2.49	0.42
1:A:788:SER:C	1:A:792:LEU:HD12	2.44	0.42
1:A:801:HIS:HB2	1:A:841:LEU:CD2	2.39	0.42
1:A:857:LEU:HD12	1:A:861:ASP:OD2	2.16	0.42
1:A:207:SER:O	1:A:249:GLN:HB2	2.19	0.42
1:A:293:THR:H	1:A:300:ILE:CD1	2.29	0.42
1:A:425:ASN:ND2	1:A:428:ASN:H	2.16	0.42
1:A:535:ILE:H	1:A:535:ILE:HG12	1.54	0.42
1:A:880:LEU:O	1:A:884:SER:HB2	2.18	0.42
1:A:292:TYR:HE2	1:A:347:VAL:HG13	1.84	0.42
1:A:323:ILE:HG12	1:A:370:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:372:THR:OG1	1:A:382:PRO:HB3	2.17	0.42
1:A:40:TYR:CZ	1:A:46:LEU:HD23	2.54	0.42
1:A:137:PHE:CZ	1:A:139:GLY:HA3	2.55	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:145:LEU:HD21	1:A:216:LEU:HD23	2.01	0.42
1:A:348:ILE:HA	1:A:352:GLU:OE1	2.18	0.42
1:A:515:ARG:NH1	1:A:518:ASP:OD1	2.52	0.42
1:A:553:ILE:CG2	1:A:554:LEU:N	2.81	0.42
1:A:803:PHE:CD1	1:A:840:SER:CB	3.02	0.42
1:A:876:LYS:NZ	1:A:919:GLN:HB3	2.34	0.42
1:A:527:ASN:ND2	1:A:571:ARG:NH1	2.67	0.42
1:A:817:GLN:NE2	1:A:820:ILE:HB	2.34	0.42
1:A:830:ASP:OD2	1:A:834:THR:N	2.52	0.42
1:A:163:HIS:O	1:A:178:LEU:N	2.50	0.42
1:A:852:VAL:HA	1:A:855:ILE:CD1	2.49	0.42
1:A:870:ASP:HB2	1:A:907:ILE:HA	2.01	0.42
1:A:1039:LEU:O	1:A:1042:TRP:HB3	2.19	0.42
1:A:171:VAL:HG13	1:A:209:PRO:HB3	2.01	0.42
1:A:422:ALA:HA	1:A:432:TRP:CE2	2.54	0.42
1:A:431:LEU:HB2	1:A:452:ALA:CB	2.49	0.42
1:A:703:PRO:HA	1:A:822:THR:HG23	2.00	0.42
1:A:795:TRP:CE3	1:A:826:LEU:HD11	2.55	0.42
1:A:858:HIS:O	1:A:862:ILE:HB	2.20	0.42
1:A:97:PHE:CD1	1:A:119:ILE:HG13	2.51	0.42
1:A:150:VAL:HB	1:A:164:LEU:HD11	2.02	0.42
1:A:235:LEU:HG	1:A:256:HIS:CE1	2.55	0.42
1:A:359:LEU:HB2	1:A:369:TYR:CE1	2.54	0.42
1:A:416:GLY:O	1:A:420:MET:HG2	2.20	0.42
1:A:976:THR:CB	1:A:1039:LEU:HD11	2.50	0.42
1:A:87:VAL:HG12	1:A:510:MET:HE1	2.02	0.42
1:A:90:PRO:HD2	1:A:93:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:103:ASN:HB2	1:A:119:ILE:O	2.20	0.42
1:A:162:ARG:HB3	1:A:180:TYR:H	1.84	0.42
1:A:294:ARG:CZ	1:A:344:GLN:HA	2.50	0.42
1:A:431:LEU:HD13	1:A:502:LEU:CD2	2.50	0.42
1:A:203:ASP:CB	1:A:250:ARG:HH22	2.33	0.41
1:A:359:LEU:HD12	1:A:360:ALA:N	2.35	0.41
1:A:704:CYS:O	1:A:707:LEU:HB3	2.20	0.41
1:A:782:GLN:HB2	1:A:786:ARG:CZ	2.50	0.41
1:A:866:LEU:HD23	1:A:866:LEU:HA	1.92	0.41
1:A:870:ASP:HB2	1:A:907:ILE:HG12	2.02	0.41
1:A:876:LYS:HB2	1:A:908:SER:O	2.20	0.41
1:A:105:MET:N	1:A:118:THR:HB	2.35	0.41
1:A:357:GLN:HG2	1:A:370:PHE:C	2.45	0.41
1:A:483:ILE:C	1:A:484:THR:HG1	2.23	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:519:GLN:H	1:A:519:GLN:HG3	1.63	0.41
1:A:923:VAL:HG13	1:A:923:VAL:O	2.20	0.41
1:A:29:LEU:HA	1:A:32:ARG:HD2	2.01	0.41
1:A:38:ARG:NH1	1:A:479:ASP:OD2	2.52	0.41
1:A:93:LEU:HD12	1:A:119:ILE:HD12	2.01	0.41
1:A:813:GLU:OE1	1:A:813:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:880:LEU:HD13	1:A:919:GLN:O	2.20	0.41
1:A:930:VAL:HA	1:A:1035:PHE:HE1	1.85	0.41
1:A:1023:MET:HE3	1:A:1026:LEU:HD12	1.99	0.41
1:A:41:PRO:O	1:A:483:ILE:HA	2.19	0.41
1:A:109:PHE:CD2	1:A:125:MET:HE1	2.54	0.41
1:A:121:SER:O	1:A:144:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:280:LEU:HG	1:A:296:GLU:HA	2.01	0.41
1:A:478:LYS:HD2	1:A:478:LYS:N	2.36	0.41
1:A:524:LEU:HB3	1:A:568:TRP:CB	2.49	0.41
1:A:862:ILE:HD12	1:A:869:THR:CA	2.51	0.41
1:A:983:VAL:HG22	1:A:1020:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:173:ILE:HG12	1:A:253:LYS:HE3	2.02	0.41
1:A:879:GLU:HG3	1:A:905:GLN:HB3	2.02	0.41
1:A:931:GLU:O	1:A:935:THR:HG23	2.20	0.41
1:A:89:LEU:HG	1:A:506:GLN:C	2.46	0.41
1:A:97:PHE:HA	1:A:100:MET:CB	2.51	0.41
1:A:479:ASP:CG	1:A:481:ILE:HG22	2.45	0.41
1:A:975:ILE:HB	1:A:1039:LEU:HD21	2.03	0.41
1:A:171:VAL:HG12	1:A:172:ASP:CG	2.46	0.41
1:A:214:TYR:C	1:A:215:LEU:HD22	2.45	0.41
1:A:360:ALA:HB3	1:A:368:LEU:HB2	2.02	0.41
1:A:467:LEU:HD12	1:A:470:ASP:HB2	2.02	0.41
1:A:520:LEU:O	1:A:538:PHE:HZ	2.04	0.41
1:A:982:LEU:CD2	1:A:1020:PHE:CE2	3.03	0.41
1:A:1069:LYS:HD3	1:A:1069:LYS:HA	1.87	0.41
1:A:63:MET:HB3	1:A:63:MET:HE3	1.96	0.41
1:A:79:PRO:HG2	1:A:514:LEU:HD12	2.01	0.41
1:A:284:ILE:HG22	1:A:291:LEU:HD13	2.01	0.41
1:A:359:LEU:HD13	1:A:369:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:374:PRO:HA	1:A:383:ASN:CG	2.46	0.41
1:A:481:ILE:HG13	1:A:482:PRO:HD2	2.02	0.41
1:A:103:ASN:HD21	1:A:143:THR:HB	1.85	0.41
1:A:206:TYR:CD2	1:A:250:ARG:HD2	2.55	0.41
1:A:294:ARG:CG	1:A:298:GLY:HA2	2.48	0.41
1:A:308:ASP:OD1	1:A:309:GLY:N	2.54	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:367:ARG:NH2	1:A:434:VAL:HG11	2.36	0.41
1:A:372:THR:HG1	1:A:382:PRO:HB2	1.85	0.41
1:A:422:ALA:HA	1:A:432:TRP:CZ2	2.56	0.41
1:A:500:PHE:HB3	1:A:502:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:550:THR:HA	1:A:553:ILE:HG21	1.92	0.41
1:A:784:LEU:HD12	1:A:784:LEU:HA	1.97	0.41
1:A:804:THR:O	1:A:817:GLN:CB	2.64	0.41
1:A:979:LEU:CD1	1:A:1020:PHE:CE1	2.73	0.41
1:A:1039:LEU:CA	1:A:1042:TRP:HB3	2.47	0.41
1:A:57:VAL:HG22	1:A:390:VAL:H	1.84	0.41
1:A:79:PRO:HA	1:A:449:GLN:O	2.21	0.41
1:A:305:LEU:HD23	1:A:305:LEU:HA	1.77	0.41
1:A:335:ASP:HA	1:A:338:VAL:CG2	2.50	0.41
1:A:421:ALA:HB3	1:A:424:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:533:GLU:O	1:A:537:ARG:CG	2.65	0.41
1:A:124:PHE:HD1	1:A:136:TYR:HA	1.87	0.40
1:A:148:GLY:HA3	1:A:218:ILE:CG2	2.52	0.40
1:A:235:LEU:HD21	1:A:291:LEU:HD21	2.02	0.40
1:A:371:SER:O	1:A:385:LEU:CD1	2.70	0.40
1:A:495:LEU:HD23	1:A:495:LEU:HA	1.86	0.40
1:A:563:ARG:NH2	1:A:567:ALA:HB2	2.37	0.40
1:A:876:LYS:HZ2	1:A:916:VAL:HG13	1.86	0.40
1:A:1043:LEU:HD12	1:A:1044:ILE:N	2.35	0.40
1:A:57:VAL:CA	1:A:390:VAL:H	2.23	0.40
1:A:112:ILE:CD1	1:A:114:ARG:HB2	2.52	0.40
1:A:156:ILE:HG21	1:A:240:TYR:CE2	2.56	0.40
1:A:158:GLN:O	1:A:159:PRO:C	2.65	0.40
1:A:676:ASN:HD22	1:A:702:VAL:HG21	1.85	0.40
1:A:1023:MET:HE1	1:A:1026:LEU:CD1	2.42	0.40
1:A:551:CYS:HB3	1:A:573:PHE:HD1	1.87	0.40
1:A:711:LEU:C	1:A:715:LYS:HZ3	2.22	0.40
1:A:926:TYR:C	1:A:1023:MET:HE2	2.45	0.40
1:A:115:ALA:HB3	1:A:126:TRP:CD1	2.56	0.40
1:A:292:TYR:HA	1:A:300:ILE:CD1	2.52	0.40
1:A:320:GLN:NE2	1:A:368:LEU:HD13	2.36	0.40
1:A:362:THR:OG1	1:A:363:HIS:N	2.53	0.40
1:A:436:HIS:CD2	1:A:436:HIS:N	2.87	0.40
1:A:477:ASN:ND2	1:A:479:ASP:O	2.55	0.40
1:A:486:SER:O	1:A:488:VAL:N	2.54	0.40
1:A:169:THR:OG1	1:A:172:ASP:N	2.35	0.40
1:A:281:GLN:HB2	1:A:294:ARG:CZ	2.51	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:320:GLN:HE22	1:A:368:LEU:HD13	1.87	0.40
1:A:339:PHE:C	1:A:339:PHE:CD1	2.99	0.40
1:A:360:ALA:N	1:A:368:LEU:O	2.30	0.40
1:A:550:THR:O	1:A:554:LEU:N	2.49	0.40
1:A:675:GLY:C	1:A:677:ILE:N	2.80	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	804/1642 (49%)	690 (86%)	106 (13%)	8 (1%)	12 47

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	41	PRO
1	A	528	VAL
1	A	678	TRP
1	A	704	CYS
1	A	807	VAL
1	A	824	LYS
1	A	202	PRO
1	A	1026	LEU

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	733/1440 (51%)	682 (93%)	51 (7%)	14	35

All (51) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	19	LEU
1	A	29	LEU
1	A	41	PRO
1	A	43	LEU
1	A	85	ARG
1	A	166	VAL
1	A	172	ASP
1	A	199	GLN
1	A	200	LEU
1	A	227	PHE
1	A	358	LEU
1	A	373	CYS
1	A	535	ILE
1	A	536	GLU
1	A	556	CYS
1	A	666	ILE
1	A	702	VAL
1	A	707	LEU
1	A	797	LEU
1	A	799	CYS
1	A	802	GLN
1	A	806	ILE
1	A	813	GLU
1	A	814	LEU
1	A	815	GLN
1	A	816	GLU
1	A	818	LEU
1	A	819	LYS
1	A	820	ILE
1	A	821	THR
1	A	823	PHE
1	A	824	LYS
1	A	825	ASP
1	A	837	LEU
1	A	838	ILE
1	A	841	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	883	ARG
1	A	884	SER
1	A	886	GLN
1	A	887	VAL
1	A	892	GLU
1	A	925	PHE
1	A	929	VAL
1	A	1019	HIS
1	A	1020	PHE
1	A	1022	GLN
1	A	1024	LEU
1	A	1027	SER
1	A	1029	ARG
1	A	1030	SER
1	A	1031	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (24) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	35	GLN
1	A	53	ASN
1	A	99	HIS
1	A	182	ASN
1	A	199	GLN
1	A	241	GLN
1	A	256	HIS
1	A	286	ASN
1	A	320	GLN
1	A	329	ASN
1	A	350	ASN
1	A	425	ASN
1	A	480	HIS
1	A	491	GLN
1	A	506	GLN
1	A	512	HIS
1	A	519	GLN
1	A	527	ASN
1	A	542	HIS
1	A	543	GLN
1	A	676	ASN
1	A	782	GLN
1	A	801	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	889	ASN

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.

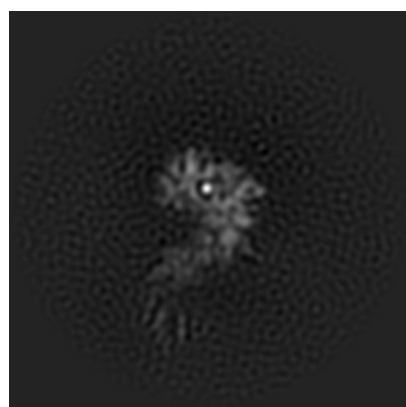
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-31384. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

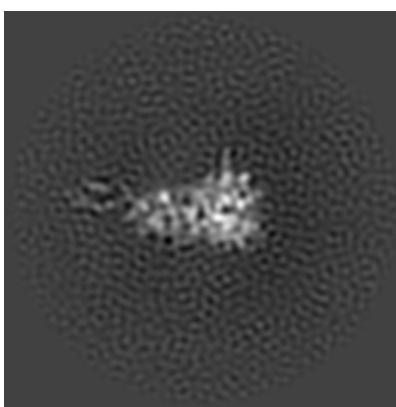
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

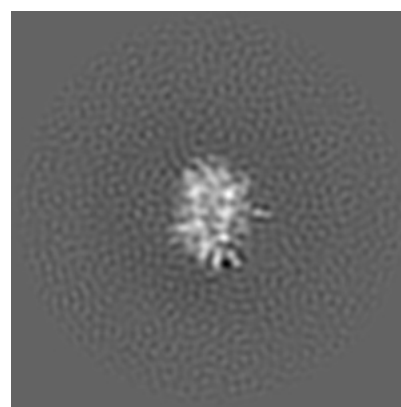
6.1.1 Primary map



X



Y

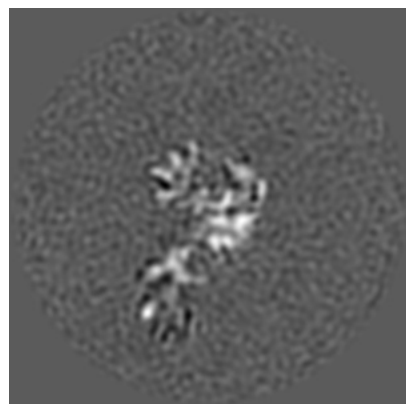


Z

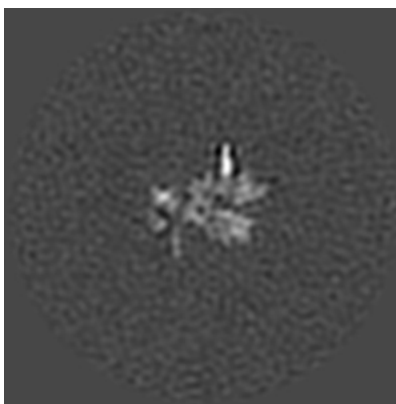
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

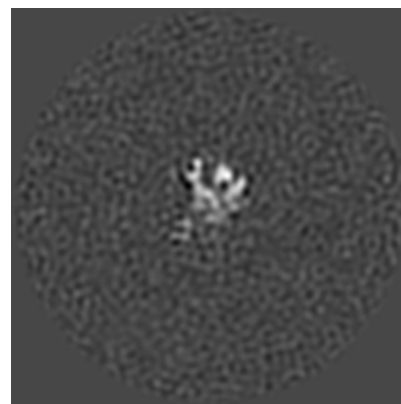
6.2.1 Primary map



X Index: 140



Y Index: 140

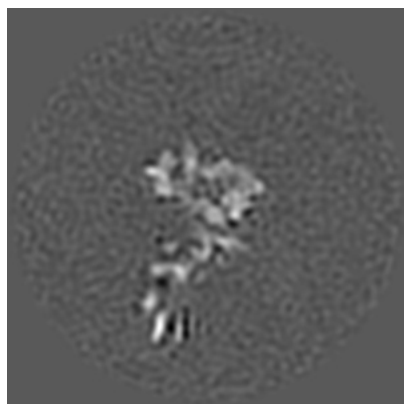


Z Index: 140

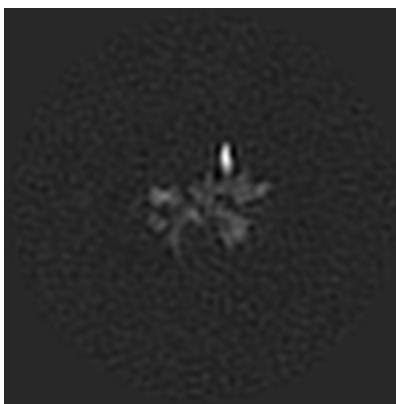
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

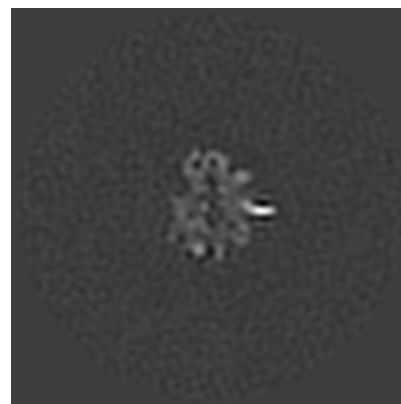
6.3.1 Primary map



X Index: 144



Y Index: 138

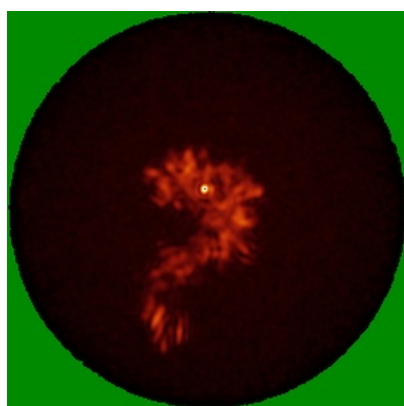


Z Index: 155

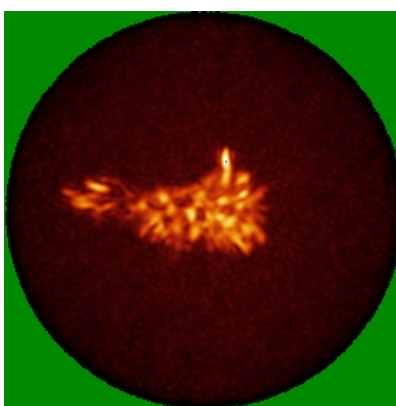
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

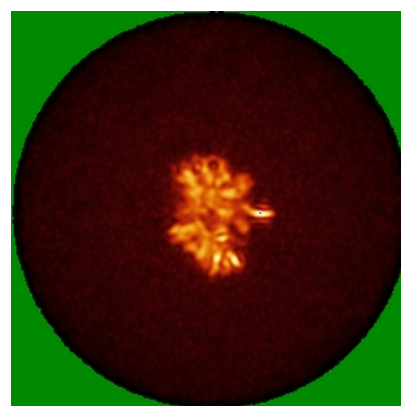
6.4.1 Primary map



X



Y



Z

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 0.26. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

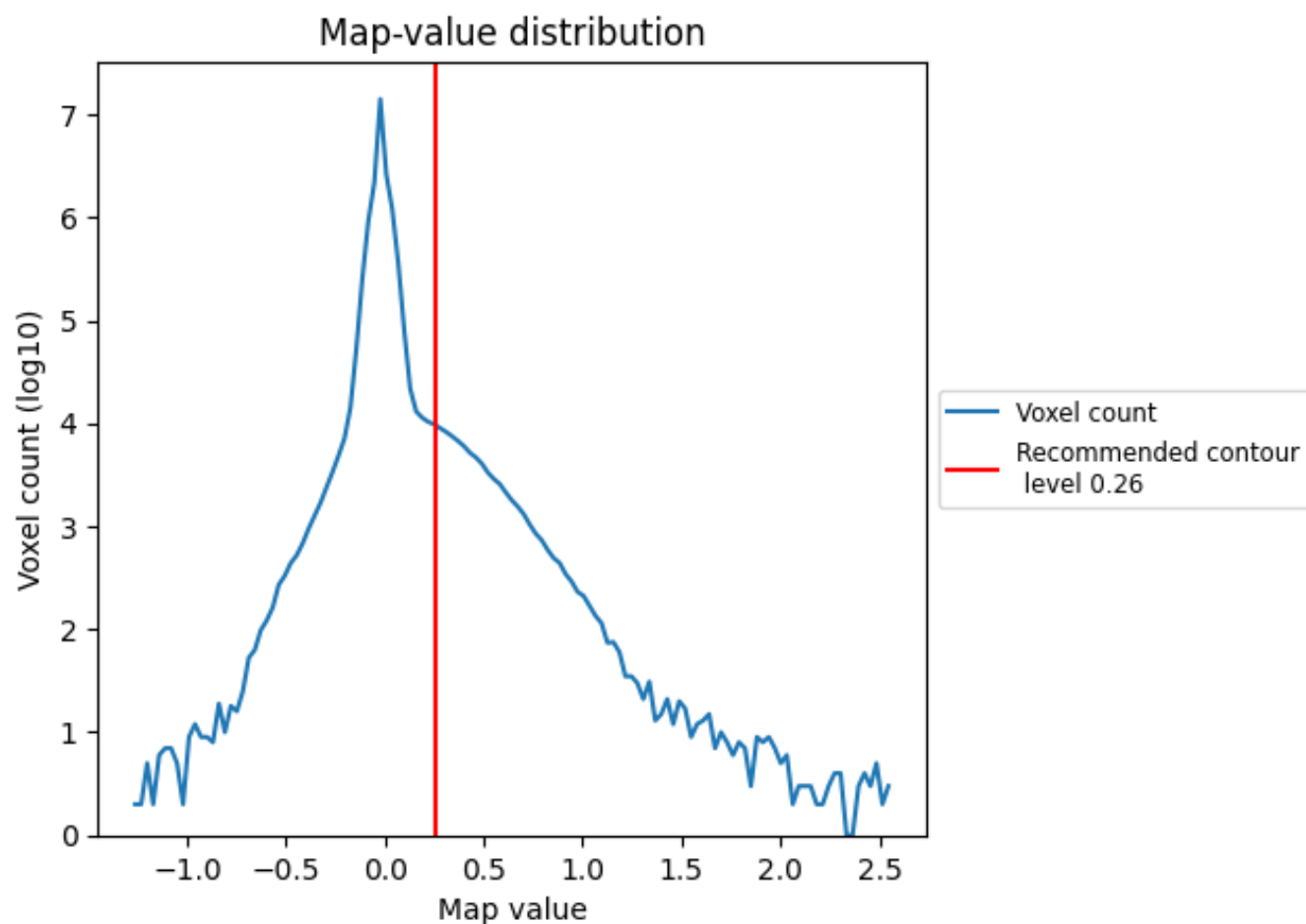
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

7 Map analysis [i](#)

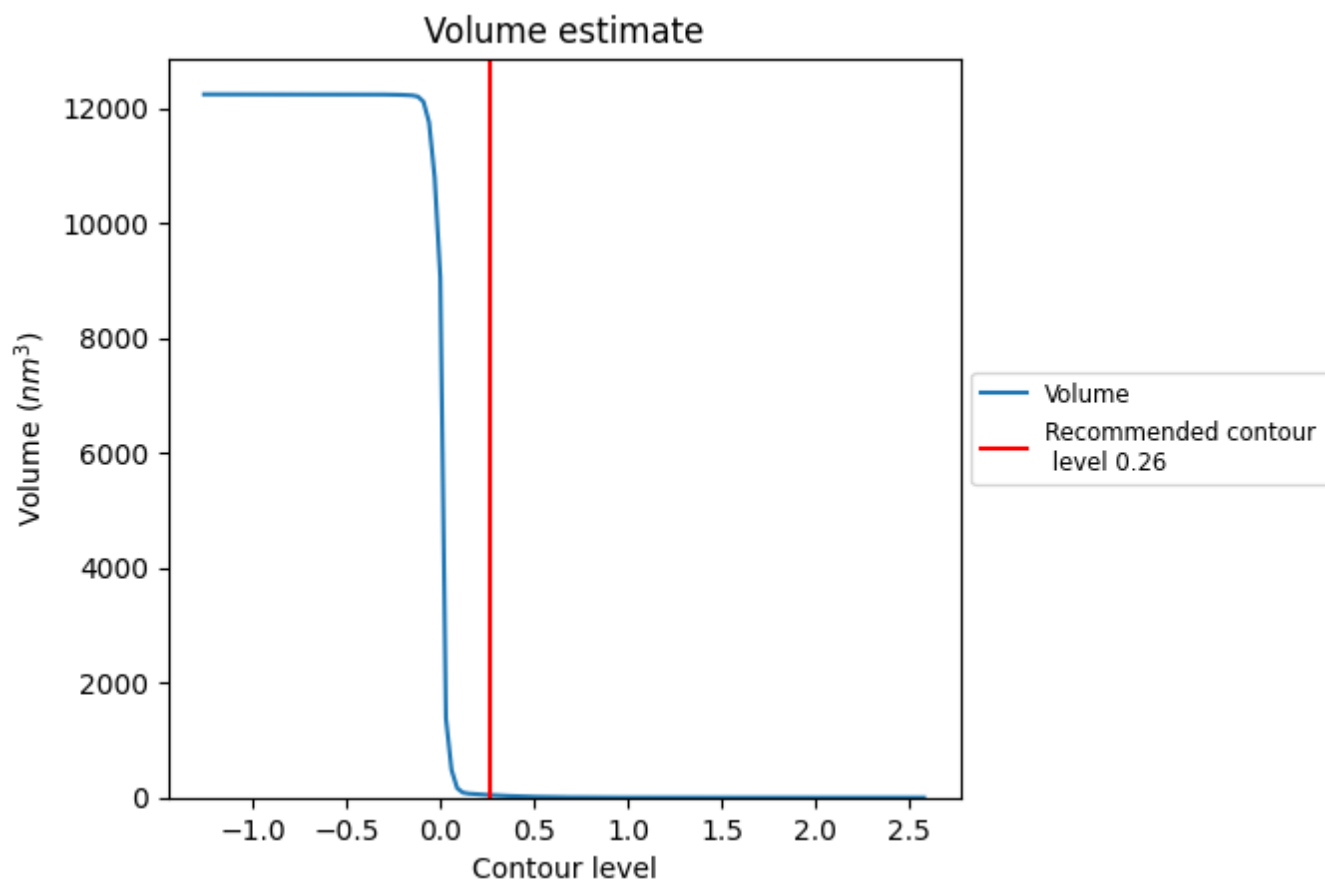
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



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

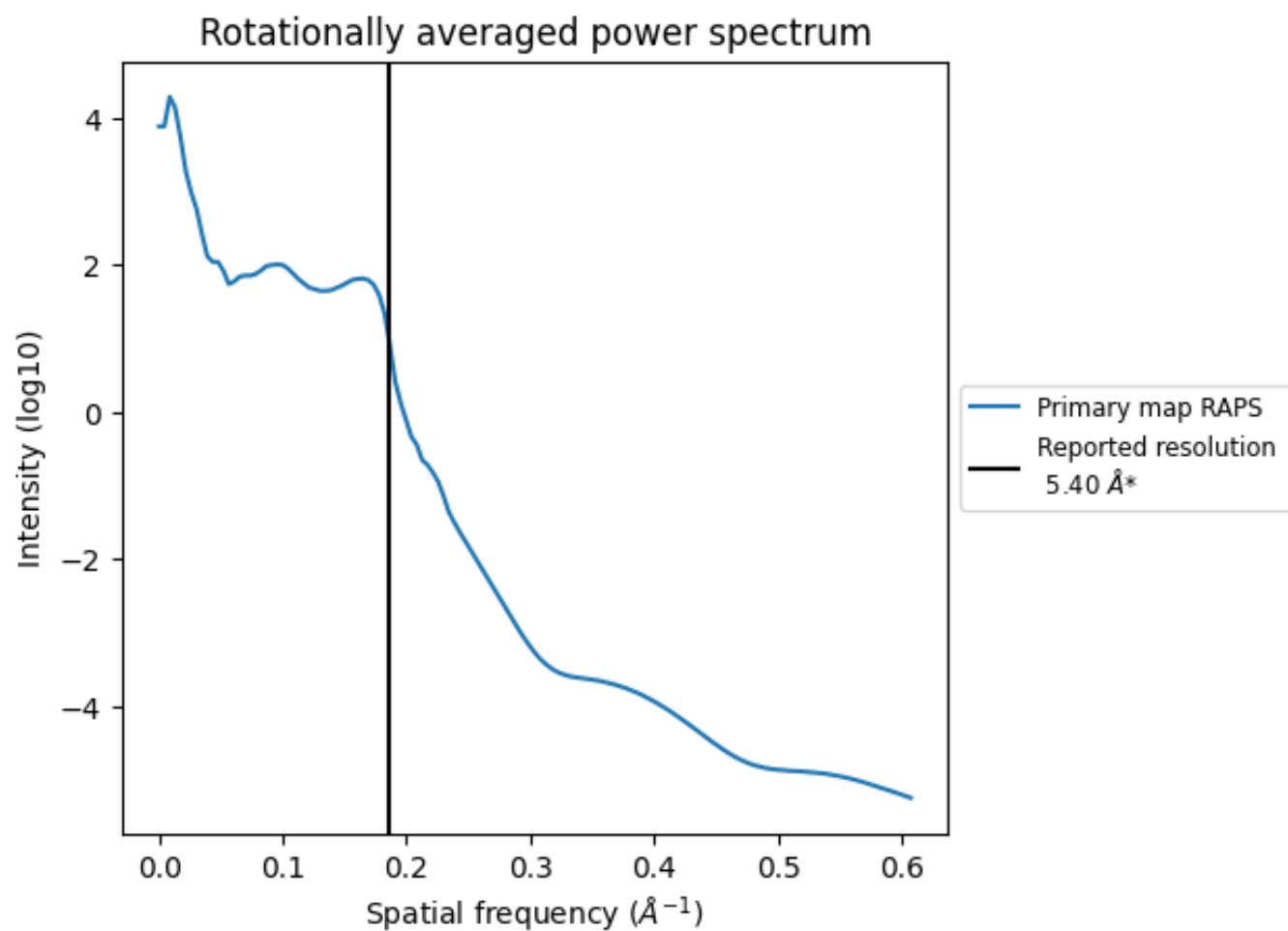
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 44 nm^3 ; this corresponds to an approximate mass of 40 kDa.

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

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ



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

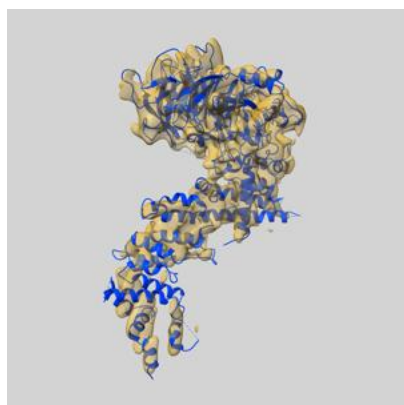
8 Fourier-Shell correlation ⓘ

This section was not generated. No FSC curve or half-maps provided.

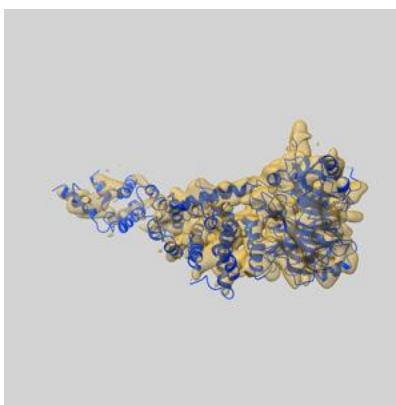
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-31384 and PDB model 7EYQ. Per-residue inclusion information can be found in [section 3](#) on [page 4](#).

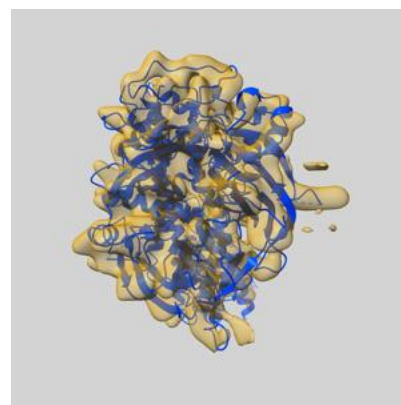
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



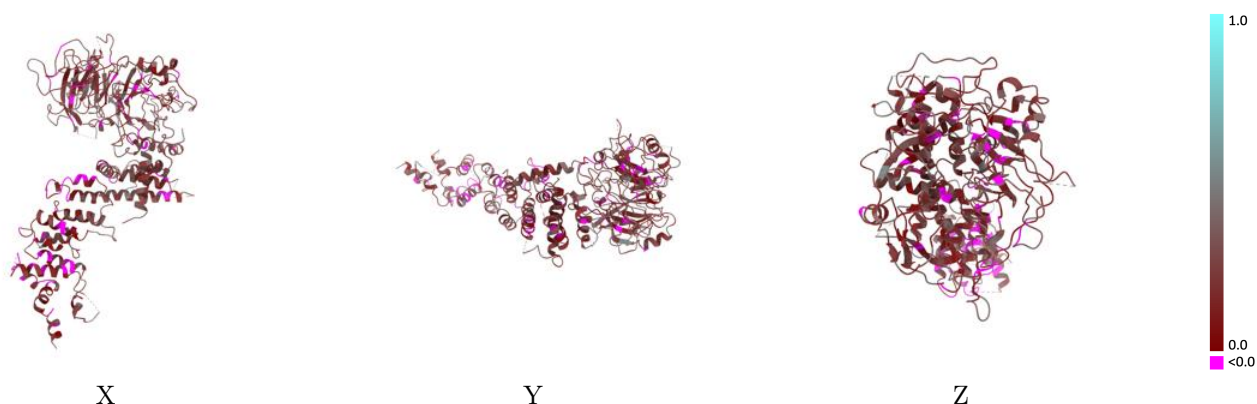
Y



Z

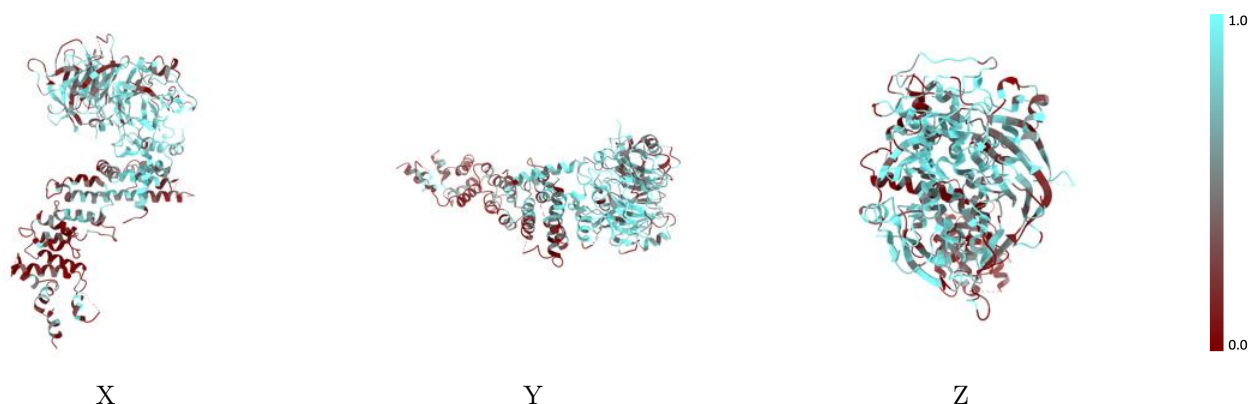
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.26 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



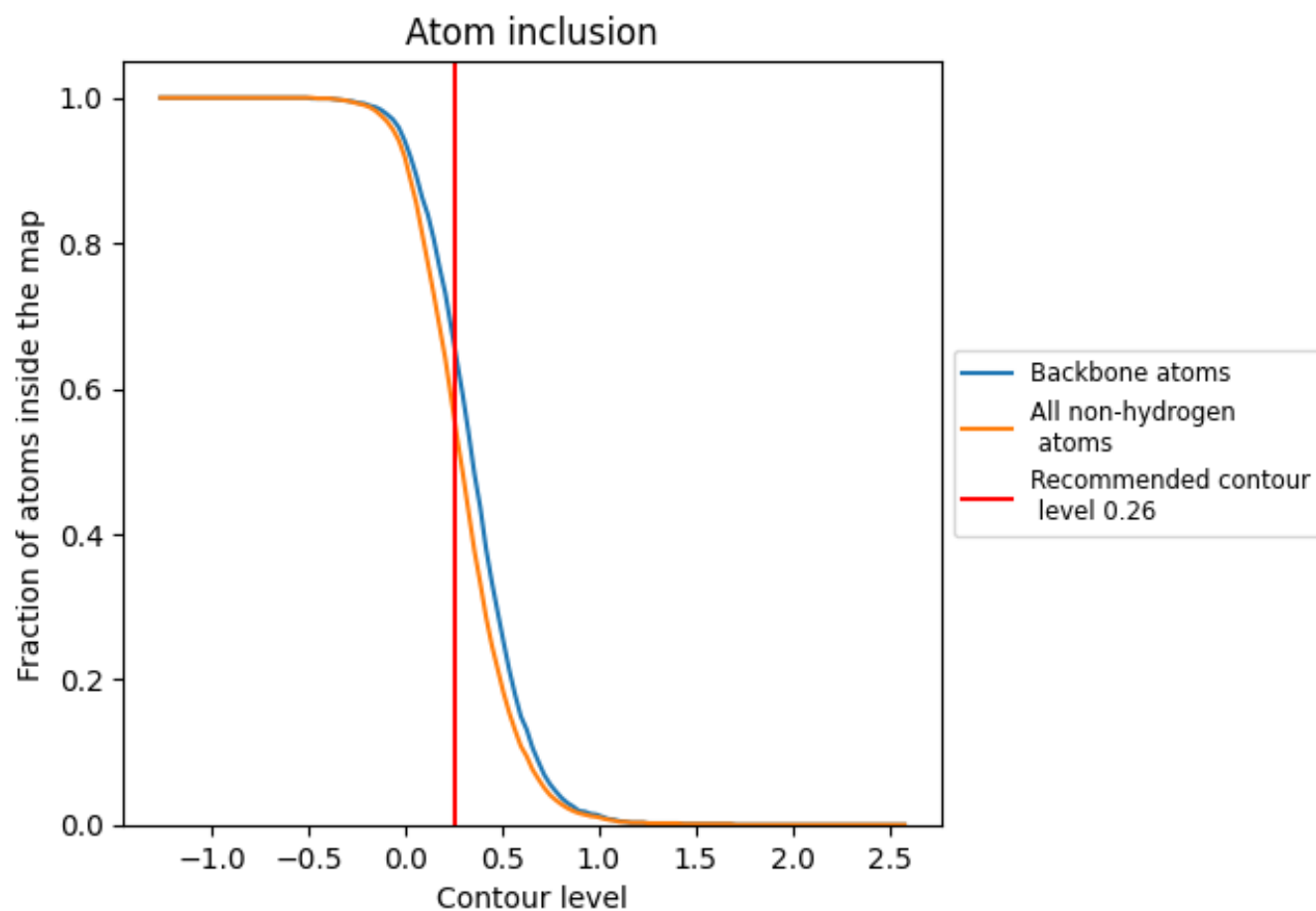
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.26).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 65% of all backbone atoms, 55% 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 (0.26) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.5480	0.2100
A	0.5480	0.2100

