



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 07:45 AM UTC

PDB ID : 6L42 / pdb_00006l42
EMDB ID : EMD-0828
Title : Structure of severe fever with thrombocytopenia syndrome virus L protein
Authors : Wang, P.; Lou, Z.
Deposited on : 2019-10-15
Resolution : 3.40 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

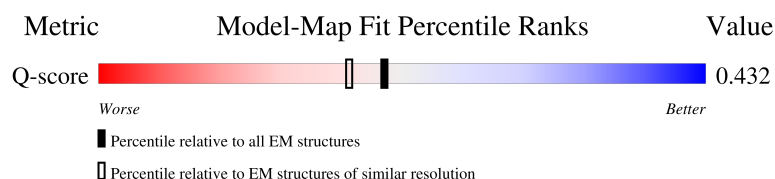
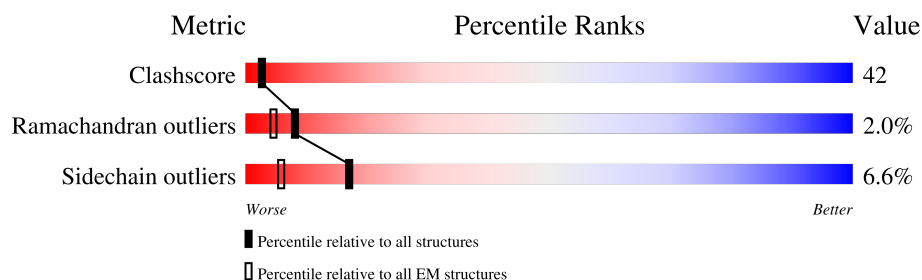
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.40 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	14717 (2.90 - 3.90)

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	2109	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 14827 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 RNA polymerase.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	1864	Total	C	N	O	S	0	0
			14826	9388	2574	2773	91		

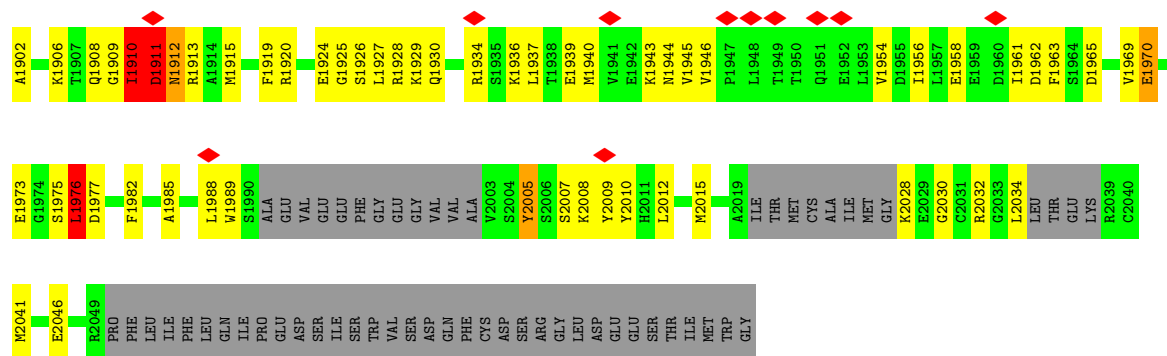
There are 26 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	-24	MET	-	initiating methionine	UNP I0DF35
A	-23	SER	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-22	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-21	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-20	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-19	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-18	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-17	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-16	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-15	HIS	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-14	ASP	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-13	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-12	ASP	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-11	ILE	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-10	PRO	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-9	THR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-8	THR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-7	GLU	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-6	ASN	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-5	LEU	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-4	TYR	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-3	PHE	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-2	GLN	-	expression tag	UNP I0DF35
A	-1	GLY	-	expression tag	UNP I0DF35
A	0	ALA	-	expression tag	UNP I0DF35
A	1321	GLU	GLN	engineered mutation	UNP I0DF35

- Molecule 2 is MAGNESIUM ION (CCD ID: MG) (formula: Mg).

Mol	Chain	Residues	Atoms		AltConf
2	A	1	Total	Mg	0
			1	1	





4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	147344	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 ($e^-/\text{\AA}^2$)	40, 40	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k), GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.061	Depositor
Minimum map value	-0.028	Depositor
Average map value	0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.002	Depositor
Recommended contour level	0.0085	Depositor
Map size (Å)	237.6, 237.6, 237.6	wwPDB
Map dimensions	220, 220, 220	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.08, 1.08, 1.08	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

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	0.93	105/15117 (0.7%)	2.15	569/20379 (2.8%)

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	94

All (105) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1520	VAL	CA-C	-23.22	1.17	1.52
1	A	892	ALA	C-N	21.80	1.59	1.34
1	A	348	THR	C-N	19.57	1.60	1.33
1	A	348	THR	CA-C	18.66	1.64	1.53
1	A	1	MET	C-N	17.37	1.58	1.33
1	A	1524	LEU	C-N	17.23	1.57	1.33
1	A	1532	ARG	C-N	16.92	1.58	1.33
1	A	1568	ARG	N-CA	16.71	1.67	1.46
1	A	1139	ASP	C-O	-16.68	1.00	1.23
1	A	1580	SER	C-N	16.57	1.56	1.33
1	A	1581	VAL	C-N	16.48	1.54	1.33
1	A	1139	ASP	N-CA	16.16	1.66	1.46
1	A	348	THR	N-CA	15.56	1.56	1.46
1	A	895	GLN	C-N	14.58	1.54	1.33
1	A	407	THR	N-CA	13.24	1.61	1.45
1	A	207	SER	CA-C	13.06	1.70	1.52
1	A	407	THR	CA-C	12.59	1.69	1.52
1	A	1575	ASP	CB-CG	-12.42	1.21	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1687	SER	C-N	11.87	1.52	1.33
1	A	411	PHE	C-N	11.76	1.57	1.33
1	A	207	SER	N-CA	11.63	1.61	1.46
1	A	563	HIS	C-N	-11.62	1.21	1.33
1	A	1578	SER	N-CA	11.36	1.60	1.46
1	A	1398	SER	C-N	11.12	1.46	1.33
1	A	1424	SER	CA-C	10.91	1.67	1.52
1	A	1521	TRP	N-CA	10.52	1.60	1.46
1	A	106	SER	C-O	10.15	1.36	1.24
1	A	357	ASP	C-O	-10.07	1.11	1.24
1	A	209	ASP	CA-C	-9.74	1.39	1.52
1	A	347	LYS	C-N	9.62	1.41	1.33
1	A	1520	VAL	C-O	9.50	1.36	1.24
1	A	357	ASP	CA-C	9.41	1.65	1.52
1	A	1589	LYS	CA-C	9.40	1.65	1.52
1	A	1589	LYS	N-CA	9.16	1.58	1.46
1	A	1141	ASP	C-O	-9.08	1.13	1.24
1	A	1393	PRO	N-CD	-8.93	1.35	1.47
1	A	208	MET	CA-C	8.87	1.64	1.52
1	A	88	SER	CA-C	-8.82	1.40	1.52
1	A	1576	ALA	CA-CB	8.77	1.68	1.53
1	A	106	SER	N-CA	-8.69	1.34	1.46
1	A	1526	ARG	CA-C	-8.60	1.41	1.52
1	A	1518	SER	C-N	8.45	1.46	1.33
1	A	208	MET	N-CA	8.44	1.57	1.46
1	A	1579	ARG	N-CA	8.45	1.57	1.46
1	A	1561	PHE	C-N	8.40	1.45	1.33
1	A	1523	GLY	CA-C	-8.38	1.40	1.51
1	A	351	GLY	C-N	-8.28	1.22	1.33
1	A	969	SER	C-N	8.27	1.45	1.33
1	A	975	PRO	N-CD	-8.22	1.36	1.47
1	A	1575	ASP	CG-OD1	-8.19	1.09	1.25
1	A	1655	SER	C-N	8.19	1.44	1.33
1	A	1520	VAL	N-CA	8.10	1.57	1.46
1	A	1811	ARG	C-N	-8.07	1.21	1.33
1	A	108	GLY	N-CA	-8.06	1.33	1.45
1	A	1521	TRP	CA-C	8.05	1.63	1.52
1	A	889	TYR	C-N	8.04	1.44	1.33
1	A	109	MET	C-O	7.95	1.33	1.24
1	A	182	PRO	C-N	-7.82	1.23	1.33
1	A	1568	ARG	C-N	-7.31	1.23	1.33
1	A	1527	THR	CA-C	-7.22	1.43	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1590	LYS	N-CA	7.17	1.55	1.46
1	A	1574	VAL	C-N	-7.16	1.23	1.33
1	A	1141	ASP	C-N	7.15	1.43	1.33
1	A	1574	VAL	N-CA	7.13	1.55	1.46
1	A	3	LEU	C-N	-7.04	1.23	1.33
1	A	1578	SER	CA-C	6.96	1.62	1.52
1	A	353	GLY	CA-C	-6.94	1.42	1.51
1	A	1678	SER	C-N	-6.89	1.23	1.33
1	A	1596	THR	CA-C	6.84	1.61	1.52
1	A	207	SER	C-N	6.52	1.42	1.33
1	A	1400	SER	C-N	-6.51	1.24	1.33
1	A	790	TRP	CA-C	6.47	1.61	1.52
1	A	1567	PHE	C-N	6.46	1.42	1.33
1	A	1397	SER	C-N	6.34	1.41	1.33
1	A	1579	ARG	CA-C	6.24	1.61	1.52
1	A	352	PHE	C-O	6.23	1.31	1.24
1	A	911	PHE	N-CA	6.21	1.53	1.46
1	A	1575	ASP	CA-C	-6.16	1.44	1.52
1	A	1393	PRO	CA-C	6.08	1.61	1.52
1	A	97	GLU	C-O	5.95	1.31	1.23
1	A	910	LEU	N-CA	5.90	1.53	1.45
1	A	1523	GLY	C-O	5.89	1.31	1.23
1	A	1587	PRO	C-N	5.86	1.41	1.33
1	A	236	PRO	N-CD	5.85	1.55	1.47
1	A	1575	ASP	C-N	-5.82	1.25	1.33
1	A	1426	SER	C-N	5.78	1.39	1.33
1	A	12	VAL	CA-C	5.76	1.60	1.52
1	A	1210	ALA	CA-C	-5.73	1.45	1.53
1	A	1521	TRP	C-N	5.64	1.40	1.33
1	A	1576	ALA	C-O	-5.63	1.16	1.24
1	A	1570	PHE	CA-C	-5.62	1.45	1.52
1	A	353	GLY	N-CA	-5.60	1.37	1.45
1	A	872	SER	C-N	5.59	1.41	1.33
1	A	1393	PRO	C-N	5.57	1.41	1.33
1	A	206	ARG	C-N	5.50	1.41	1.33
1	A	1545	PHE	N-CA	5.43	1.53	1.46
1	A	380	VAL	C-N	-5.34	1.26	1.33
1	A	1576	ALA	CA-C	5.32	1.59	1.52
1	A	1573	HIS	N-CA	-5.26	1.39	1.46
1	A	1573	HIS	CA-C	-5.26	1.46	1.53
1	A	1424	SER	N-CA	5.19	1.52	1.46
1	A	1519	GLU	C-N	5.19	1.39	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	353	GLY	C-N	-5.14	1.26	1.33
1	A	1575	ASP	CA-CB	5.07	1.62	1.53
1	A	406	ILE	CA-C	-5.02	1.47	1.52

All (569) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	348	THR	O-C-N	-55.41	79.92	121.47
1	A	1580	SER	O-C-N	-32.21	78.20	122.97
1	A	1584	LEU	O-C-N	-31.75	89.16	123.13
1	A	1581	VAL	O-C-N	30.97	161.28	122.57
1	A	1567	PHE	O-C-N	-30.23	83.09	122.39
1	A	873	LYS	CA-C-N	29.04	167.90	123.47
1	A	873	LYS	C-N-CA	29.04	167.90	123.47
1	A	915	GLN	N-CA-C	-27.77	72.37	108.19
1	A	1559	GLY	CA-C-N	27.43	154.12	119.84
1	A	1559	GLY	C-N-CA	27.43	154.12	119.84
1	A	1582	ARG	O-C-N	-27.26	90.97	122.32
1	A	1	MET	O-C-N	-27.25	79.40	123.00
1	A	104	ASP	CB-CA-C	-26.45	74.26	112.09
1	A	1655	SER	CA-C-N	26.42	161.66	121.76
1	A	1655	SER	C-N-CA	26.42	161.66	121.76
1	A	1574	VAL	O-C-N	-25.73	90.40	122.57
1	A	1687	SER	O-C-N	-24.80	83.31	123.00
1	A	563	HIS	O-C-N	-24.65	94.08	122.92
1	A	1576	ALA	O-C-N	-24.44	90.09	122.59
1	A	104	ASP	N-CA-C	24.20	158.26	107.67
1	A	1551	ASP	CA-C-N	24.08	144.72	119.19
1	A	1551	ASP	C-N-CA	24.08	144.72	119.19
1	A	374	LEU	N-CA-C	23.89	148.11	111.56
1	A	579	LEU	N-CA-C	-23.82	71.82	110.17
1	A	1546	ALA	N-CA-C	-23.42	75.82	110.48
1	A	349	ASP	N-CA-C	-23.02	80.48	112.94
1	A	1398	SER	N-CA-C	-22.94	74.60	109.24
1	A	546	LEU	N-CA-C	-22.30	81.76	110.53
1	A	87	LEU	N-CA-C	22.21	141.99	112.90
1	A	1696	GLN	N-CA-C	22.00	141.74	111.39
1	A	411	PHE	O-C-N	21.95	151.78	122.59
1	A	355	LEU	N-CA-C	-21.92	78.02	110.24
1	A	348	THR	CA-C-N	21.90	156.09	122.37
1	A	348	THR	C-N-CA	21.90	156.09	122.37
1	A	1391	HIS	N-CA-C	21.79	139.54	113.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	974	GLY	CA-C-N	21.33	146.50	119.84
1	A	974	GLY	C-N-CA	21.33	146.50	119.84
1	A	374	LEU	CA-C-N	21.19	162.94	121.41
1	A	374	LEU	C-N-CA	21.19	162.94	121.41
1	A	871	ARG	N-CA-CB	-20.72	77.77	110.92
1	A	1434	GLN	N-CA-C	-20.65	77.13	108.52
1	A	1687	SER	CA-C-N	-20.45	92.01	122.68
1	A	1687	SER	C-N-CA	-20.45	92.01	122.68
1	A	848	MET	N-CA-C	-20.35	72.59	107.80
1	A	1393	PRO	O-C-N	-20.33	95.19	122.64
1	A	1696	GLN	CB-CA-C	-20.27	83.10	111.89
1	A	849	LYS	N-CA-CB	-19.83	80.70	110.84
1	A	1520	VAL	CA-C-N	-19.77	86.54	121.14
1	A	1520	VAL	C-N-CA	-19.77	86.54	121.14
1	A	790	TRP	N-CA-C	19.69	152.74	110.80
1	A	725	GLY	N-CA-C	-19.61	79.52	112.06
1	A	1209	GLU	N-CA-C	19.59	136.49	112.59
1	A	1519	GLU	O-C-N	-19.32	97.11	122.23
1	A	1139	ASP	CA-C-O	-19.32	97.41	119.24
1	A	1141	ASP	CA-C-O	-19.26	99.35	120.92
1	A	1209	GLU	CB-CA-C	-19.24	80.05	111.02
1	A	1433	THR	N-CA-C	-19.18	69.95	110.80
1	A	88	SER	N-CA-C	-19.02	90.18	113.01
1	A	353	GLY	CA-C-N	18.63	154.14	121.92
1	A	353	GLY	C-N-CA	18.63	154.14	121.92
1	A	1519	GLU	N-CA-CB	-18.56	82.54	110.20
1	A	1561	PHE	O-C-N	-18.07	102.25	122.85
1	A	108	GLY	CA-C-O	-18.04	89.18	120.57
1	A	1065	MET	N-CA-C	-18.03	81.01	109.50
1	A	1573	HIS	O-C-N	-17.78	95.94	122.96
1	A	1575	ASP	CA-C-N	17.66	155.26	121.54
1	A	1575	ASP	C-N-CA	17.66	155.26	121.54
1	A	359	GLY	CA-C-N	17.61	155.17	121.54
1	A	359	GLY	C-N-CA	17.61	155.17	121.54
1	A	1868	ASN	N-CA-C	-17.55	70.64	107.67
1	A	1519	GLU	N-CA-C	17.42	133.11	111.69
1	A	1522	PHE	O-C-N	17.40	143.09	123.25
1	A	1655	SER	N-CA-C	-17.22	76.32	108.17
1	A	349	ASP	CA-C-N	-17.16	92.05	120.71
1	A	349	ASP	C-N-CA	-17.16	92.05	120.71
1	A	1866	TRP	CA-C-N	17.15	154.30	121.54
1	A	1866	TRP	C-N-CA	17.15	154.30	121.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1575	ASP	N-CA-C	-17.15	74.27	110.80
1	A	380	VAL	O-C-N	-17.10	100.78	122.32
1	A	359	GLY	N-CA-C	17.09	138.09	115.36
1	A	1574	VAL	CA-C-N	17.07	154.14	121.54
1	A	1574	VAL	C-N-CA	17.07	154.14	121.54
1	A	1811	ARG	O-C-N	-16.96	100.31	122.19
1	A	375	GLY	N-CA-C	16.89	153.20	113.18
1	A	1522	PHE	CA-C-N	-16.80	88.47	121.41
1	A	1522	PHE	C-N-CA	-16.80	88.47	121.41
1	A	347	LYS	CA-C-N	-16.80	104.89	123.04
1	A	347	LYS	C-N-CA	-16.80	104.89	123.04
1	A	1867	SER	CB-CA-C	-16.63	77.33	110.42
1	A	1393	PRO	N-CA-C	16.41	146.28	112.47
1	A	870	HIS	N-CA-C	-16.32	84.07	109.85
1	A	12	VAL	O-C-N	16.30	142.94	122.57
1	A	212	ILE	N-CA-C	-16.29	82.08	108.95
1	A	1524	LEU	N-CA-C	16.21	137.27	107.60
1	A	1518	SER	CA-C-N	-16.20	92.88	120.58
1	A	1518	SER	C-N-CA	-16.20	92.88	120.58
1	A	1654	PHE	O-C-N	16.09	141.99	123.01
1	A	418	SER	CB-CA-C	16.02	142.29	110.42
1	A	102	THR	N-CA-C	15.69	144.22	110.80
1	A	1581	VAL	CA-C-N	-15.59	93.27	121.81
1	A	1581	VAL	C-N-CA	-15.59	93.27	121.81
1	A	1576	ALA	CA-C-O	-15.31	98.61	120.51
1	A	726	ARG	N-CA-CB	-15.26	88.12	110.24
1	A	1575	ASP	N-CA-CB	-15.18	84.83	110.49
1	A	975	PRO	O-C-N	15.08	143.00	122.64
1	A	1546	ALA	CB-CA-C	15.04	137.13	109.46
1	A	96	SER	CB-CA-C	14.54	139.37	110.42
1	A	1139	ASP	CA-CB-CG	-14.48	98.12	112.60
1	A	95	LEU	O-C-N	-14.42	103.41	122.59
1	A	873	LYS	O-C-N	-14.29	103.59	122.59
1	A	1523	GLY	CA-C-N	-14.28	89.07	122.20
1	A	1523	GLY	C-N-CA	-14.28	89.07	122.20
1	A	1532	ARG	CA-C-N	-14.08	96.51	120.58
1	A	1532	ARG	C-N-CA	-14.08	96.51	120.58
1	A	382	SER	CB-CA-C	13.40	128.68	110.06
1	A	407	THR	N-CA-C	13.34	131.09	110.42
1	A	872	SER	N-CA-C	13.28	129.57	111.24
1	A	1432	SER	N-CA-C	13.27	129.59	109.41
1	A	1866	TRP	O-C-N	-13.27	106.50	122.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1568	ARG	O-C-N	-13.22	105.00	122.59
1	A	1140	MET	CA-C-N	13.13	140.51	120.82
1	A	1140	MET	C-N-CA	13.13	140.51	120.82
1	A	1397	SER	CA-C-N	-13.12	100.95	122.21
1	A	1397	SER	C-N-CA	-13.12	100.95	122.21
1	A	1552	PRO	N-CA-C	-13.12	96.39	113.57
1	A	563	HIS	CA-C-N	13.03	141.88	121.95
1	A	563	HIS	C-N-CA	13.03	141.88	121.95
1	A	1580	SER	CA-C-N	12.87	145.14	121.97
1	A	1580	SER	C-N-CA	12.87	145.14	121.97
1	A	1140	MET	N-CA-C	-12.84	95.61	112.68
1	A	1913	ARG	N-CA-CB	-12.81	90.84	110.06
1	A	181	MET	N-CA-C	-12.78	82.56	109.01
1	A	824	GLN	N-CA-C	12.66	131.72	114.12
1	A	1397	SER	O-C-N	-12.57	105.94	122.28
1	A	1434	GLN	N-CA-CB	12.55	131.20	111.24
1	A	1792	GLY	N-CA-C	-12.49	83.57	113.18
1	A	1576	ALA	CA-C-N	12.46	145.33	121.54
1	A	1576	ALA	C-N-CA	12.46	145.33	121.54
1	A	1393	PRO	N-CD-CG	-12.33	84.70	103.20
1	A	109	MET	CB-CA-C	-12.32	85.90	110.42
1	A	1529	LEU	CB-CA-C	12.26	131.35	109.64
1	A	87	LEU	CB-CA-C	-12.23	85.08	109.67
1	A	1023	ARG	N-CA-C	-12.20	86.69	107.80
1	A	1459	ASN	N-CA-C	-12.18	92.38	108.34
1	A	1697	SER	N-CA-C	12.13	127.91	111.90
1	A	102	THR	CB-CA-C	-12.06	86.42	110.42
1	A	1393	PRO	N-CA-CB	-12.05	90.59	103.25
1	A	1575	ASP	CA-CB-CG	12.01	124.61	112.60
1	A	1572	ALA	N-CA-C	11.97	125.63	111.02
1	A	2	ASN	CA-C-N	11.90	144.27	121.54
1	A	2	ASN	C-N-CA	11.90	144.27	121.54
1	A	896	ALA	N-CA-CB	-11.87	90.43	110.49
1	A	1583	LEU	O-C-N	-11.86	106.82	122.59
1	A	975	PRO	CB-CA-C	-11.78	92.12	111.56
1	A	848	MET	CB-CA-C	-11.72	93.51	110.62
1	A	1208	THR	CA-C-N	-11.70	104.07	122.67
1	A	1208	THR	C-N-CA	-11.70	104.07	122.67
1	A	895	GLN	CA-C-N	-11.69	99.21	121.54
1	A	895	GLN	C-N-CA	-11.69	99.21	121.54
1	A	209	ASP	CA-C-N	11.67	136.30	120.54
1	A	209	ASP	C-N-CA	11.67	136.30	120.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1057	HIS	N-CA-C	11.66	124.07	111.36
1	A	1678	SER	N-CA-C	-11.60	93.19	110.24
1	A	95	LEU	CA-C-N	-11.46	99.65	121.54
1	A	95	LEU	C-N-CA	-11.46	99.65	121.54
1	A	977	SER	CA-C-N	11.42	142.53	121.97
1	A	977	SER	C-N-CA	11.42	142.53	121.97
1	A	1461	GLU	N-CA-C	-11.39	100.10	114.56
1	A	974	GLY	O-C-N	11.38	133.15	121.77
1	A	1584	LEU	CA-C-N	-11.34	102.48	120.86
1	A	1584	LEU	C-N-CA	-11.34	102.48	120.86
1	A	896	ALA	CB-CA-C	-11.29	87.95	110.42
1	A	1391	HIS	CB-CA-C	-11.17	87.72	109.95
1	A	355	LEU	CB-CA-C	11.13	126.53	109.84
1	A	352	PHE	N-CA-CB	11.10	129.25	110.49
1	A	1586	ALA	CA-C-N	-11.04	108.72	119.76
1	A	1586	ALA	C-N-CA	-11.04	108.72	119.76
1	A	1793	PHE	N-CA-C	11.02	126.28	111.30
1	A	1587	PRO	N-CA-C	10.98	128.44	111.19
1	A	687	LEU	N-CA-C	10.86	124.42	111.82
1	A	896	ALA	CA-C-N	10.77	141.85	122.46
1	A	896	ALA	C-N-CA	10.77	141.85	122.46
1	A	348	THR	N-CA-C	10.77	117.61	108.78
1	A	1066	ASP	N-CA-CB	-10.77	93.17	110.51
1	A	889	TYR	N-CA-C	-10.55	98.81	113.37
1	A	894	GLY	CA-C-N	-10.53	107.07	121.71
1	A	894	GLY	C-N-CA	-10.53	107.07	121.71
1	A	347	LYS	O-C-N	10.49	135.03	122.75
1	A	384	PRO	O-C-N	-10.47	105.19	122.36
1	A	1526	ARG	CA-C-N	10.40	136.35	122.84
1	A	1526	ARG	C-N-CA	10.40	136.35	122.84
1	A	1442	LEU	N-CA-C	10.37	123.85	111.82
1	A	1798	ALA	N-CA-C	-10.36	88.73	110.80
1	A	109	MET	N-CA-C	10.23	132.60	110.80
1	A	1011	HIS	N-CA-C	10.21	122.36	111.03
1	A	1696	GLN	N-CA-CB	10.15	126.72	111.70
1	A	888	TRP	CB-CA-C	10.15	130.61	110.42
1	A	1141	ASP	N-CA-C	-10.09	94.72	111.37
1	A	1523	GLY	O-C-N	-10.08	109.59	122.70
1	A	1523	GLY	CA-C-O	-10.00	103.17	120.57
1	A	353	GLY	CA-C-O	9.96	137.91	120.57
1	A	1579	ARG	CA-C-N	-9.92	105.29	123.05
1	A	1579	ARG	C-N-CA	-9.92	105.29	123.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	974	GLY	N-CA-C	-9.88	92.18	112.34
1	A	1424	SER	N-CA-C	9.84	131.76	110.80
1	A	1575	ASP	CA-C-O	9.80	134.53	120.51
1	A	1527	THR	N-CA-C	-9.79	91.46	108.20
1	A	1400	SER	CA-C-N	-9.78	100.82	121.64
1	A	1400	SER	C-N-CA	-9.78	100.82	121.64
1	A	1061	GLU	CA-C-N	9.75	137.14	121.34
1	A	1061	GLU	C-N-CA	9.75	137.14	121.34
1	A	1586	ALA	N-CA-C	-9.71	96.92	110.31
1	A	1975	SER	N-CA-C	9.70	124.69	113.15
1	A	353	GLY	O-C-N	9.70	135.31	122.70
1	A	1569	ASN	N-CA-C	9.61	124.56	113.02
1	A	1577	LYS	O-C-N	-9.49	109.97	122.59
1	A	1519	GLU	CB-CA-C	9.47	128.03	110.70
1	A	978	ILE	N-CA-C	-9.47	89.64	109.34
1	A	824	GLN	CA-C-N	9.43	133.86	120.28
1	A	824	GLN	C-N-CA	9.43	133.86	120.28
1	A	209	ASP	N-CA-C	-9.41	90.76	110.80
1	A	871	ARG	CB-CA-C	-9.40	95.88	111.02
1	A	238	ILE	N-CA-C	9.39	125.94	113.07
1	A	1677	LEU	N-CA-C	9.38	124.35	113.19
1	A	1654	PHE	CA-C-N	9.36	138.79	122.32
1	A	1654	PHE	C-N-CA	9.36	138.79	122.32
1	A	2	ASN	CB-CA-C	9.30	128.93	110.42
1	A	406	ILE	CA-C-N	-9.28	105.84	122.74
1	A	406	ILE	C-N-CA	-9.28	105.84	122.74
1	A	110	THR	N-CA-CB	-9.27	93.88	110.37
1	A	893	VAL	O-C-N	9.24	134.54	122.26
1	A	1182	ASN	CA-C-N	9.18	133.78	120.38
1	A	1182	ASN	C-N-CA	9.18	133.78	120.38
1	A	1208	THR	N-CA-C	-9.15	95.33	109.52
1	A	10	ILE	N-CA-C	9.11	120.50	110.21
1	A	204	LYS	N-CA-C	9.10	122.18	111.71
1	A	1446	SER	N-CA-C	9.09	130.16	110.80
1	A	183	LEU	N-CA-C	9.07	121.57	110.41
1	A	209	ASP	O-C-N	8.97	134.53	122.59
1	A	1588	VAL	O-C-N	-8.96	111.38	122.57
1	A	106	SER	CA-C-O	8.92	133.26	120.51
1	A	384	PRO	CA-N-CD	-8.91	99.52	112.00
1	A	182	PRO	CA-N-CD	-8.91	99.53	112.00
1	A	379	GLY	CA-C-N	-8.91	112.79	122.59
1	A	379	GLY	C-N-CA	-8.91	112.79	122.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	81	ASP	N-CA-C	8.87	123.94	113.20
1	A	1350	ALA	N-CA-C	-8.87	102.03	113.12
1	A	1426	SER	O-C-N	-8.84	110.83	122.59
1	A	411	PHE	CA-C-N	-8.84	100.23	121.80
1	A	411	PHE	C-N-CA	-8.84	100.23	121.80
1	A	1390	VAL	CB-CA-C	8.84	123.60	112.02
1	A	1529	LEU	CA-C-N	8.83	135.73	121.87
1	A	1529	LEU	C-N-CA	8.83	135.73	121.87
1	A	95	LEU	N-CA-C	-8.81	92.03	110.80
1	A	627	LEU	N-CA-C	8.79	123.73	112.92
1	A	1573	HIS	N-CA-C	-8.75	90.10	107.69
1	A	976	GLY	N-CA-C	8.69	131.63	111.04
1	A	348	THR	CA-C-O	-8.69	112.90	117.94
1	A	1068	GLY	N-CA-C	8.68	133.75	113.18
1	A	1545	PHE	CA-C-N	8.66	135.76	121.39
1	A	1545	PHE	C-N-CA	8.66	135.76	121.39
1	A	1071	TYR	N-CA-C	8.62	123.10	108.02
1	A	11	ASN	CA-C-N	8.60	137.45	121.97
1	A	11	ASN	C-N-CA	8.60	137.45	121.97
1	A	741	THR	N-CA-C	-8.60	98.12	110.59
1	A	386	LYS	N-CA-C	-8.59	102.00	111.36
1	A	978	ILE	CB-CA-C	8.55	125.31	111.29
1	A	742	ASN	N-CA-C	8.54	120.91	110.41
1	A	672	GLU	N-CA-C	8.53	123.10	112.87
1	A	1774	ILE	N-CA-C	8.51	120.12	108.89
1	A	1570	PHE	CB-CA-C	-8.48	95.29	109.03
1	A	210	ALA	CA-C-N	-8.40	108.45	121.56
1	A	210	ALA	C-N-CA	-8.40	108.45	121.56
1	A	211	ASP	CB-CA-C	8.39	121.37	109.71
1	A	1433	THR	CB-CA-C	-8.36	93.79	110.42
1	A	110	THR	N-CA-C	8.29	128.14	109.81
1	A	1791	SER	N-CA-C	-8.28	97.53	110.36
1	A	1444	MET	N-CA-C	8.27	120.29	111.28
1	A	598	PHE	N-CA-C	8.27	122.83	111.17
1	A	410	ARG	N-CA-C	8.24	121.32	111.02
1	A	874	LEU	N-CA-C	-8.21	103.21	113.23
1	A	1060	ARG	CA-C-N	-8.21	111.03	122.93
1	A	1060	ARG	C-N-CA	-8.21	111.03	122.93
1	A	14	ASN	N-CA-C	8.18	119.42	108.38
1	A	1059	ASN	N-CA-C	8.18	121.14	110.43
1	A	1518	SER	CB-CA-C	8.16	123.87	110.81
1	A	979	ASN	N-CA-CB	8.13	126.64	111.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1552	PRO	CA-C-N	-8.12	107.34	122.60
1	A	1552	PRO	C-N-CA	-8.12	107.34	122.60
1	A	579	LEU	CB-CA-C	-8.09	95.83	109.50
1	A	1576	ALA	N-CA-C	8.03	127.90	110.80
1	A	580	THR	N-CA-C	8.02	121.58	109.63
1	A	1773	GLY	N-CA-C	7.99	126.40	115.30
1	A	1524	LEU	CB-CA-C	-7.98	99.57	111.70
1	A	979	ASN	N-CA-C	-7.98	96.47	108.99
1	A	1141	ASP	CA-C-N	-7.94	110.12	120.44
1	A	1141	ASP	C-N-CA	-7.94	110.12	120.44
1	A	1426	SER	CA-C-N	7.94	133.75	122.72
1	A	1426	SER	C-N-CA	7.94	133.75	122.72
1	A	1520	VAL	N-CA-C	-7.94	100.93	112.04
1	A	1296	ALA	N-CA-C	7.93	122.22	112.23
1	A	1061	GLU	O-C-N	7.92	133.27	123.21
1	A	866	THR	N-CA-C	7.87	122.64	112.41
1	A	3	LEU	CB-CA-C	7.86	126.07	110.42
1	A	1139	ASP	N-CA-C	7.86	123.54	113.88
1	A	1524	LEU	O-C-N	7.83	137.65	122.22
1	A	97	GLU	CA-C-N	-7.83	107.89	121.97
1	A	97	GLU	C-N-CA	-7.83	107.89	121.97
1	A	1574	VAL	N-CA-C	7.80	125.56	109.34
1	A	1273	LEU	N-CA-C	-7.76	97.54	109.65
1	A	952	VAL	CB-CA-C	-7.73	103.36	110.63
1	A	1368	ASN	CB-CA-C	7.73	119.70	109.65
1	A	695	ARG	N-CA-C	7.73	119.39	110.97
1	A	1811	ARG	N-CA-C	-7.66	103.92	112.57
1	A	1424	SER	CA-C-N	7.63	131.91	120.31
1	A	1424	SER	C-N-CA	7.63	131.91	120.31
1	A	323	THR	N-CA-C	7.63	119.50	111.03
1	A	110	THR	CA-C-N	7.59	129.11	120.98
1	A	110	THR	C-N-CA	7.59	129.11	120.98
1	A	382	SER	N-CA-C	-7.58	98.92	110.30
1	A	969	SER	CA-C-N	-7.58	108.80	121.92
1	A	969	SER	C-N-CA	-7.58	108.80	121.92
1	A	109	MET	CA-C-O	7.58	131.34	120.51
1	A	1402	GLY	N-CA-C	7.52	131.00	113.18
1	A	82	PHE	N-CA-C	7.51	119.25	111.14
1	A	873	LYS	N-CA-C	-7.49	94.85	110.80
1	A	961	ILE	CB-CA-C	-7.49	104.47	111.06
1	A	1656	THR	N-CA-C	-7.47	94.61	107.61
1	A	87	LEU	CA-C-N	7.45	135.93	121.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	87	LEU	C-N-CA	7.45	135.93	121.18
1	A	209	ASP	N-CA-CB	-7.42	97.94	110.49
1	A	181	MET	CA-C-N	-7.42	104.02	120.56
1	A	181	MET	C-N-CA	-7.42	104.02	120.56
1	A	1582	ARG	CA-C-N	7.41	135.69	121.54
1	A	1582	ARG	C-N-CA	7.41	135.69	121.54
1	A	1697	SER	N-CA-CB	7.39	123.24	112.08
1	A	872	SER	N-CA-CB	-7.36	100.02	111.65
1	A	1587	PRO	O-C-N	7.34	131.91	123.10
1	A	1589	LYS	N-CA-C	7.29	126.34	110.80
1	A	913	LYS	N-CA-C	-7.29	95.74	108.20
1	A	929	ALA	N-CA-C	-7.22	104.33	113.72
1	A	976	GLY	CA-C-N	7.19	135.28	121.54
1	A	976	GLY	C-N-CA	7.19	135.28	121.54
1	A	106	SER	CA-C-N	-7.17	107.74	122.58
1	A	106	SER	C-N-CA	-7.17	107.74	122.58
1	A	1521	TRP	CB-CA-C	7.17	124.97	109.99
1	A	737	SER	N-CA-C	-7.16	96.84	108.52
1	A	1434	GLN	CB-CA-C	7.13	121.47	109.99
1	A	1655	SER	CB-CA-C	-7.12	99.66	111.41
1	A	1559	GLY	C-N-CD	-7.09	95.92	125.00
1	A	791	GLY	N-CA-C	-7.08	100.57	111.12
1	A	1134	ILE	O-C-N	7.05	131.27	123.09
1	A	1295	ARG	N-CA-C	-7.04	103.53	111.14
1	A	1969	VAL	N-CA-C	7.03	123.97	109.34
1	A	1654	PHE	CB-CA-C	6.97	121.31	109.53
1	A	1138	SER	CA-C-N	6.94	134.30	122.36
1	A	1138	SER	C-N-CA	6.94	134.30	122.36
1	A	212	ILE	N-CA-CB	6.93	124.08	112.44
1	A	1003	CYS	N-CA-C	6.89	121.39	113.19
1	A	514	VAL	CB-CA-C	-6.88	104.16	110.91
1	A	2005	TYR	N-CA-C	6.87	121.52	113.20
1	A	1970	GLU	N-CA-C	6.87	125.42	110.80
1	A	888	TRP	N-CA-C	-6.86	96.18	110.80
1	A	1976	LEU	N-CA-C	6.84	118.73	111.28
1	A	790	TRP	N-CA-CB	-6.84	98.94	110.49
1	A	1462	ARG	N-CA-CB	-6.83	101.18	110.67
1	A	161	GLU	CB-CA-C	-6.82	97.90	112.63
1	A	1552	PRO	CA-C-O	-6.79	109.35	119.34
1	A	1047	PRO	N-CA-C	-6.79	105.69	114.03
1	A	1059	ASN	O-C-N	-6.76	114.83	122.75
1	A	919	LEU	N-CA-C	-6.73	95.24	107.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1520	VAL	CA-C-O	-6.73	111.51	119.85
1	A	1458	PRO	CB-CA-C	-6.69	100.88	112.06
1	A	106	SER	CB-CA-C	6.69	123.72	110.42
1	A	238	ILE	CB-CA-C	-6.68	89.72	110.97
1	A	547	LYS	N-CA-C	6.68	120.34	110.46
1	A	1578	SER	CA-C-O	-6.66	110.98	120.51
1	A	30	ARG	CA-C-N	6.65	128.15	119.84
1	A	30	ARG	C-N-CA	6.65	128.15	119.84
1	A	1528	LYS	CA-C-O	-6.64	111.02	120.51
1	A	11	ASN	O-C-N	-6.64	115.69	123.25
1	A	1066	ASP	N-CA-C	-6.63	100.16	110.17
1	A	1479	GLU	N-CA-C	6.63	121.58	112.04
1	A	206	ARG	O-C-N	-6.58	115.10	122.86
1	A	374	LEU	N-CA-CB	-6.56	99.91	110.14
1	A	376	ASN	N-CA-C	-6.56	105.27	113.20
1	A	1181	TYR	N-CA-C	-6.55	96.85	110.80
1	A	1596	THR	CA-C-N	6.55	133.76	121.97
1	A	1596	THR	C-N-CA	6.55	133.76	121.97
1	A	627	LEU	N-CA-CB	-6.54	101.02	110.56
1	A	1373	TYR	N-CA-C	6.52	121.37	113.41
1	A	1194	PRO	CB-CA-C	6.52	118.66	111.56
1	A	974	GLY	C-N-CD	-6.50	98.33	125.00
1	A	93	ARG	N-CA-C	6.49	118.89	111.11
1	A	893	VAL	CA-C-N	6.48	134.12	121.41
1	A	893	VAL	C-N-CA	6.48	134.12	121.41
1	A	889	TYR	CA-C-N	-6.48	110.31	121.97
1	A	889	TYR	C-N-CA	-6.48	110.31	121.97
1	A	1426	SER	N-CA-C	6.44	124.51	110.80
1	A	1249	LEU	N-CA-C	6.43	121.33	112.90
1	A	1433	THR	CA-C-N	6.43	136.27	121.87
1	A	1433	THR	C-N-CA	6.43	136.27	121.87
1	A	1125	SER	N-CA-C	6.40	119.50	109.96
1	A	1560	PRO	CA-C-N	-6.39	107.90	121.32
1	A	1560	PRO	C-N-CA	-6.39	107.90	121.32
1	A	353	GLY	N-CA-C	-6.39	98.03	113.18
1	A	872	SER	O-C-N	6.36	130.68	122.86
1	A	106	SER	N-CA-C	-6.35	97.28	110.80
1	A	284	SER	N-CA-C	-6.34	104.24	112.23
1	A	1940	MET	N-CA-C	6.34	121.04	113.12
1	A	1462	ARG	N-CA-C	6.33	122.07	113.97
1	A	1138	SER	CA-C-O	6.33	124.74	120.19
1	A	1458	PRO	N-CA-C	-6.33	94.17	113.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	895	GLN	N-CA-C	-6.30	98.35	110.56
1	A	107	ASP	O-C-N	6.29	130.53	122.10
1	A	206	ARG	CA-C-N	6.29	133.56	121.54
1	A	206	ARG	C-N-CA	6.29	133.56	121.54
1	A	1139	ASP	O-C-N	6.28	130.77	122.36
1	A	103	HIS	N-CA-C	6.24	124.09	110.80
1	A	1910	ILE	N-CA-C	6.18	116.28	106.32
1	A	1056	PHE	N-CA-C	-6.18	102.11	111.56
1	A	1970	GLU	N-CA-CB	-6.17	100.06	110.49
1	A	374	LEU	CB-CA-C	-6.16	99.51	111.03
1	A	1460	GLN	N-CA-C	-6.15	101.07	110.30
1	A	349	ASP	N-CA-CB	6.14	121.12	110.98
1	A	1206	SER	N-CA-C	6.12	118.50	108.52
1	A	410	ARG	O-C-N	-6.08	115.59	123.32
1	A	1573	HIS	CA-C-O	-6.07	112.92	120.57
1	A	1575	ASP	O-C-N	6.06	130.65	122.59
1	A	1944	ASN	N-CA-C	-6.06	101.34	110.24
1	A	1555	THR	CA-C-N	6.05	132.89	121.81
1	A	1555	THR	C-N-CA	6.05	132.89	121.81
1	A	1349	GLN	N-CA-C	6.05	122.69	113.61
1	A	1732	THR	N-CA-C	6.04	120.78	113.41
1	A	1447	ILE	N-CA-C	-6.01	103.87	112.35
1	A	107	ASP	N-CA-C	-6.01	105.86	113.43
1	A	418	SER	N-CA-C	-6.01	98.00	110.80
1	A	1059	ASN	CA-C-N	6.01	132.51	121.70
1	A	1059	ASN	C-N-CA	6.01	132.51	121.70
1	A	211	ASP	N-CA-CB	-6.00	100.16	109.34
1	A	210	ALA	CA-C-O	-5.99	114.49	120.90
1	A	1811	ARG	CA-C-N	5.96	133.10	121.41
1	A	1811	ARG	C-N-CA	5.96	133.10	121.41
1	A	896	ALA	N-CA-C	5.95	123.48	110.80
1	A	1547	TRP	CA-C-N	-5.93	113.82	122.65
1	A	1547	TRP	C-N-CA	-5.93	113.82	122.65
1	A	1568	ARG	NE-CZ-NH2	-5.90	113.89	119.20
1	A	1585	GLY	O-C-N	5.89	130.45	123.61
1	A	1173	VAL	N-CA-C	5.89	116.78	108.36
1	A	1569	ASN	N-CA-CB	-5.88	101.94	110.47
1	A	2010	TYR	N-CA-C	-5.86	104.30	112.45
1	A	1297	CYS	N-CA-C	-5.83	104.89	112.23
1	A	951	THR	N-CA-C	-5.82	103.67	111.87
1	A	110	THR	O-C-N	-5.81	114.63	121.32
1	A	164	ARG	N-CA-C	-5.80	97.87	108.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1210	ALA	N-CA-C	-5.79	96.99	107.75
1	A	894	GLY	CA-C-O	-5.76	110.54	120.57
1	A	1070	THR	CA-C-N	-5.76	114.66	123.07
1	A	1070	THR	C-N-CA	-5.76	114.66	123.07
1	A	1390	VAL	N-CA-C	-5.76	105.11	110.53
1	A	104	ASP	CA-C-N	5.75	127.59	120.34
1	A	104	ASP	C-N-CA	5.75	127.59	120.34
1	A	1124	GLY	N-CA-C	-5.75	103.78	112.41
1	A	953	ALA	N-CA-C	-5.74	103.87	111.96
1	A	108	GLY	O-C-N	5.73	130.15	122.70
1	A	1400	SER	CA-C-O	-5.72	112.33	120.51
1	A	1557	ARG	N-CA-C	-5.71	106.02	112.87
1	A	875	LEU	N-CA-C	-5.68	106.39	113.38
1	A	207	SER	CA-C-O	-5.68	112.39	120.51
1	A	1594	VAL	CA-C-N	5.65	131.87	121.70
1	A	1594	VAL	C-N-CA	5.65	131.87	121.70
1	A	1295	ARG	CB-CA-C	5.64	119.81	110.90
1	A	1560	PRO	CB-CA-C	5.63	120.86	111.56
1	A	1562	LEU	CB-CA-C	-5.63	100.24	109.53
1	A	238	ILE	N-CA-CB	-5.60	98.88	111.87
1	A	1796	LYS	N-CA-C	5.60	122.19	109.81
1	A	403	GLU	N-CA-C	5.60	118.10	111.33
1	A	1532	ARG	O-C-N	5.57	129.99	122.59
1	A	983	SER	N-CA-C	-5.56	98.57	108.13
1	A	1299	THR	N-CA-C	5.56	119.79	111.96
1	A	1545	PHE	CA-C-O	5.56	128.46	120.51
1	A	1643	GLU	N-CA-C	-5.54	104.74	112.45
1	A	596	THR	CA-C-N	5.54	130.83	122.68
1	A	596	THR	C-N-CA	5.54	130.83	122.68
1	A	1341	TYR	N-CA-C	5.54	120.69	113.88
1	A	181	MET	C-N-CD	5.53	147.68	125.00
1	A	1066	ASP	CB-CA-C	-5.52	100.56	111.60
1	A	559	LYS	N-CA-C	5.49	119.46	112.87
1	A	1134	ILE	N-CA-C	5.49	115.59	108.35
1	A	1573	HIS	CA-C-N	-5.49	112.09	121.97
1	A	1573	HIS	C-N-CA	-5.49	112.09	121.97
1	A	1393	PRO	CA-C-O	-5.45	110.67	120.60
1	A	1400	SER	O-C-N	5.45	129.84	122.59
1	A	186	ASP	N-CA-C	5.44	116.89	111.07
1	A	873	LYS	CB-CA-C	5.41	121.19	110.42
1	A	1373	TYR	N-CA-CB	-5.41	102.57	110.47
1	A	1911	ASP	N-CA-CB	-5.41	102.82	111.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1023	ARG	CB-CA-C	5.39	118.49	110.62
1	A	2007	SER	N-CA-C	5.39	118.19	111.24
1	A	357	ASP	CB-CA-C	5.39	121.14	110.42
1	A	182	PRO	O-C-N	-5.38	112.28	121.75
1	A	185	GLN	N-CA-C	5.37	118.29	111.69
1	A	1591	SER	CA-C-N	5.37	131.93	121.41
1	A	1591	SER	C-N-CA	5.37	131.93	121.41
1	A	1912	ASN	CB-CA-C	-5.37	102.60	111.51
1	A	1393	PRO	CA-N-CD	5.36	119.51	112.00
1	A	376	ASN	O-C-N	-5.36	114.46	122.39
1	A	205	ALA	N-CA-C	-5.35	106.53	113.16
1	A	351	GLY	CA-C-O	-5.35	111.26	120.57
1	A	962	ILE	N-CA-C	-5.34	105.17	111.00
1	A	1595	THR	CA-C-O	-5.34	111.71	120.80
1	A	1046	ASP	CB-CA-C	-5.33	99.97	110.10
1	A	1830	GLY	N-CA-C	-5.32	100.58	113.18
1	A	727	VAL	CB-CA-C	-5.32	102.57	111.29
1	A	1909	GLY	N-CA-C	-5.31	100.89	111.34
1	A	1362	VAL	N-CA-C	-5.30	105.22	111.00
1	A	1656	THR	CB-CA-C	5.29	118.15	110.79
1	A	1521	TRP	CA-C-O	5.29	125.87	119.31
1	A	412	LYS	N-CA-CB	-5.29	100.96	110.37
1	A	324	SER	CA-C-N	-5.29	111.12	121.06
1	A	324	SER	C-N-CA	-5.29	111.12	121.06
1	A	402	LYS	N-CA-C	5.28	118.27	110.46
1	A	247	ASN	CB-CA-C	-5.24	101.31	110.17
1	A	727	VAL	N-CA-C	5.24	120.25	109.34
1	A	1793	PHE	N-CA-CB	5.24	119.11	111.62
1	A	1357	LEU	CA-C-N	5.23	125.97	120.11
1	A	1357	LEU	C-N-CA	5.23	125.97	120.11
1	A	1530	GLY	O-C-N	-5.23	116.54	121.77
1	A	1274	GLY	N-CA-C	-5.23	100.78	113.18
1	A	1065	MET	CB-CA-C	5.23	120.30	109.38
1	A	406	ILE	CB-CA-C	-5.21	105.01	111.32
1	A	1357	LEU	N-CA-C	5.21	121.34	109.81
1	A	1810	GLU	CA-C-N	-5.21	114.81	122.83
1	A	1810	GLU	C-N-CA	-5.21	114.81	122.83
1	A	1273	LEU	N-CA-CB	5.20	119.39	110.65
1	A	1450	MET	N-CA-C	-5.20	106.62	113.17
1	A	839	THR	N-CA-CB	-5.19	102.89	110.47
1	A	1205	ILE	CB-CA-C	-5.18	103.99	111.34
1	A	1301	ASP	N-CA-C	-5.17	99.78	110.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1561	PHE	CA-C-N	5.17	129.75	122.09
1	A	1561	PHE	C-N-CA	5.17	129.75	122.09
1	A	1551	ASP	C-N-CD	-5.15	103.90	125.00
1	A	2	ASN	N-CA-C	-5.14	99.84	110.80
1	A	1885	CYS	N-CA-C	-5.14	99.39	108.23
1	A	928	ASN	CB-CA-C	-5.13	100.86	109.27
1	A	1523	GLY	N-CA-C	-5.13	101.03	113.18
1	A	1633	LEU	N-CA-C	-5.13	101.77	109.15
1	A	323	THR	CA-C-N	-5.11	115.20	122.41
1	A	323	THR	C-N-CA	-5.11	115.20	122.41
1	A	357	ASP	CA-C-O	-5.11	113.20	120.51
1	A	1595	THR	CB-CA-C	5.10	120.33	109.10
1	A	562	SER	N-CA-C	5.08	119.53	113.23
1	A	1174	ASN	CA-C-N	-5.08	113.50	120.71
1	A	1174	ASN	C-N-CA	-5.08	113.50	120.71
1	A	283	ASP	CB-CA-C	-5.08	100.84	109.38
1	A	350	SER	N-CA-C	5.08	117.59	111.40
1	A	1521	TRP	N-CA-CB	5.08	118.67	110.40
1	A	1590	LYS	CA-C-O	-5.08	113.25	120.51
1	A	911	PHE	N-CA-CB	-5.07	101.96	111.13
1	A	1442	LEU	CB-CA-C	-5.05	100.97	110.67
1	A	387	GLU	CA-C-N	-5.05	113.83	123.32
1	A	387	GLU	C-N-CA	-5.05	113.83	123.32
1	A	97	GLU	CA-C-O	-5.05	116.02	121.87
1	A	1527	THR	CA-C-O	5.05	125.79	120.54
1	A	1556	LEU	O-C-N	-5.04	116.52	122.32
1	A	724	GLU	N-CA-CB	5.04	119.00	110.49
1	A	821	HIS	N-CA-C	5.03	119.28	112.04
1	A	236	PRO	CB-CA-C	-5.01	104.38	110.95
1	A	819	GLN	N-CA-C	-5.00	107.03	113.23

There are no chirality outliers.

All (94) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1	MET	Mainchain
1	A	1059	ASN	Peptide
1	A	1061	GLU	Mainchain
1	A	107	ASP	Mainchain
1	A	108	GLY	Mainchain
1	A	11	ASN	Mainchain
1	A	1135	ARG	Mainchain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1182	ASN	Peptide
1	A	1268	ASP	Peptide
1	A	1393	PRO	Mainchain
1	A	1397	SER	Mainchain
1	A	1398	SER	Peptide,Mainchain
1	A	1399	LEU	Mainchain
1	A	1424	SER	Mainchain
1	A	1433	THR	Peptide
1	A	1518	SER	Mainchain
1	A	1519	GLU	Mainchain
1	A	1520	VAL	Mainchain
1	A	1521	TRP	Peptide
1	A	1522	PHE	Mainchain
1	A	1523	GLY	Mainchain
1	A	1524	LEU	Mainchain
1	A	1529	LEU	Peptide
1	A	1530	GLY	Mainchain
1	A	1549	SER	Mainchain
1	A	1559	GLY	Peptide
1	A	1561	PHE	Peptide,Mainchain
1	A	1562	LEU	Mainchain
1	A	1567	PHE	Mainchain
1	A	1569	ASN	Mainchain
1	A	1573	HIS	Peptide,Mainchain
1	A	1574	VAL	Peptide,Mainchain
1	A	1575	ASP	Sidechain
1	A	1576	ALA	Peptide,Mainchain
1	A	1577	LYS	Mainchain
1	A	1578	SER	Peptide,Mainchain
1	A	1580	SER	Mainchain
1	A	1582	ARG	Peptide,Mainchain
1	A	1583	LEU	Mainchain
1	A	1584	LEU	Mainchain
1	A	1594	VAL	Peptide
1	A	1595	THR	Mainchain
1	A	1655	SER	Peptide
1	A	1678	SER	Peptide,Mainchain
1	A	1687	SER	Peptide,Mainchain
1	A	1797	PRO	Peptide
1	A	180	ASN	Mainchain
1	A	1817	GLU	Peptide
1	A	1830	GLY	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1866	TRP	Peptide
1	A	2	ASN	Mainchain
1	A	208	MET	Peptide
1	A	3	LEU	Mainchain
1	A	348	THR	Peptide,Mainchain
1	A	349	ASP	Mainchain
1	A	350	SER	Mainchain
1	A	351	GLY	Mainchain
1	A	352	PHE	Sidechain
1	A	359	GLY	Peptide
1	A	374	LEU	Peptide
1	A	375	GLY	Peptide
1	A	378	GLU	Mainchain
1	A	380	VAL	Mainchain
1	A	384	PRO	Mainchain
1	A	385	ALA	Mainchain
1	A	405	LYS	Mainchain
1	A	406	ILE	Mainchain
1	A	563	HIS	Mainchain
1	A	677	PRO	Peptide
1	A	822	GLY	Peptide
1	A	824	GLN	Peptide
1	A	873	LYS	Peptide
1	A	887	MET	Mainchain
1	A	893	VAL	Mainchain
1	A	895	GLN	Mainchain
1	A	896	ALA	Peptide
1	A	95	LEU	Peptide,Mainchain
1	A	96	SER	Mainchain
1	A	965	HIS	Peptide
1	A	969	SER	Mainchain
1	A	971	ARG	Mainchain
1	A	975	PRO	Peptide
1	A	976	GLY	Mainchain

5.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	14826	0	14795	1230	0
2	A	1	0	0	0	0
All	All	14827	0	14795	1230	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 42.

All (1230) 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:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:CD2	1.27	1.67
1:A:917:GLY:CA	1:A:920:ARG:HD3	1.26	1.65
1:A:1568:ARG:CA	1:A:1568:ARG:N	1.67	1.55
1:A:193:TYR:CE1	1:A:197:ILE:HD11	1.40	1.55
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CE1	1.83	1.55
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:HZ1	0.91	1.52
1:A:757:ASN:N	1:A:915:GLN:HE21	1.03	1.52
1:A:365:TRP:NE1	1:A:595:LEU:CD1	1.68	1.51
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:CE1	0.99	1.50
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:HB2	1.46	1.49
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:HA	1.31	1.44
1:A:1646:LYS:NZ	1:A:1650:ILE:HD11	1.24	1.43
1:A:365:TRP:NE1	1:A:595:LEU:HD12	1.09	1.42
1:A:658:LYS:HZ2	1:A:699:GLN:CD	1.29	1.41
1:A:757:ASN:H	1:A:915:GLN:NE2	1.15	1.40
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:CD	1.79	1.39
1:A:351:GLY:HA3	1:A:369:LEU:CD1	1.50	1.39
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:CE3	1.58	1.39
1:A:1556:LEU:CD1	1:A:1564:HIS:CD2	2.07	1.37
1:A:1556:LEU:HG	1:A:1564:HIS:CE1	1.58	1.37
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CZ	2.07	1.36
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:CG2	1.74	1.35
1:A:1392:SER:HB2	1:A:1393:PRO:CD	1.58	1.33
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:CD	1.58	1.33
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:NZ	1.01	1.33
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:CD1	2.11	1.32
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:OG	1.19	1.31
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:HD11	1.61	1.31
1:A:1392:SER:CB	1:A:1393:PRO:HD3	1.57	1.30
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CB	2.12	1.30
1:A:658:LYS:CD	1:A:699:GLN:OE1	1.79	1.30
1:A:1304:ARG:CG	1:A:1432:SER:OG	1.79	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1474:VAL:CG1	1:A:1585:GLY:O	1.77	1.29
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:OE1	1.77	1.29
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:NZ	1.44	1.29
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:HB2	1.70	1.27
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:N	1.50	1.27
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:CZ	1.70	1.25
1:A:1542:ARG:HH22	1:A:1549:SER:C	1.44	1.25
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:CD2	1.84	1.25
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:CE	1.66	1.25
1:A:1531:PRO:O	1:A:1535:LYS:HB3	1.36	1.24
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:HD11	1.71	1.24
1:A:1646:LYS:O	1:A:1649:MET:HE2	1.38	1.24
1:A:1649:MET:SD	1:A:1649:MET:N	2.11	1.24
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:CA	2.01	1.23
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:HG2	1.34	1.23
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:CD2	1.69	1.23
1:A:1551:ASP:O	1:A:1555:THR:HG23	1.37	1.22
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:CG	1.87	1.22
1:A:155:ARG:NH2	1:A:1532:ARG:HG3	1.52	1.21
1:A:1646:LYS:O	1:A:1649:MET:CE	1.87	1.21
1:A:1062:VAL:CG1	1:A:1064:TRP:HE3	1.53	1.21
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CG	2.28	1.20
1:A:1542:ARG:HH22	1:A:1550:THR:N	1.40	1.19
1:A:757:ASN:O	1:A:915:GLN:NE2	1.73	1.19
1:A:3:LEU:O	1:A:7:CYS:SG	2.00	1.18
1:A:1303:GLY:O	1:A:1432:SER:HB2	1.42	1.18
1:A:155:ARG:HH21	1:A:1532:ARG:CG	1.56	1.18
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:CG	1.72	1.18
1:A:365:TRP:CD1	1:A:595:LEU:HD12	1.77	1.18
1:A:1474:VAL:CB	1:A:1585:GLY:O	1.92	1.18
1:A:1646:LYS:C	1:A:1649:MET:HE1	1.66	1.18
1:A:1403:HIS:O	1:A:1406:PRO:HD2	1.41	1.17
1:A:658:LYS:HD2	1:A:699:GLN:OE1	1.33	1.17
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:HG23	1.28	1.17
1:A:883:GLU:HB2	1:A:1355:MET:HE2	1.20	1.16
1:A:917:GLY:CA	1:A:920:ARG:CD	2.18	1.16
1:A:721:ILE:O	1:A:727:VAL:HG23	1.43	1.16
1:A:3:LEU:HD13	1:A:87:LEU:O	1.48	1.14
1:A:1652:GLU:CD	1:A:1653:ALA:H	1.56	1.14
1:A:81:ASP:O	1:A:85:SER:OG	1.64	1.14
1:A:1474:VAL:HB	1:A:1585:GLY:O	1.46	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1804:CYS:O	1.46	1.14
1:A:1556:LEU:CD1	1:A:1564:HIS:NE2	2.08	1.13
1:A:335:TRP:NE1	1:A:594:GLU:OE1	1.81	1.12
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:OE1	1.73	1.12
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:HD11	1.28	1.12
1:A:193:TYR:CE1	1:A:197:ILE:CD1	2.33	1.12
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:CD1	1.80	1.11
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:HD21	1.49	1.10
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:HD23	1.81	1.10
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:HB2	1.52	1.10
1:A:1460:GLN:O	1:A:1460:GLN:NE2	1.84	1.09
1:A:380:VAL:HG22	1:A:411:PHE:CZ	1.85	1.09
1:A:1265:LEU:HD13	1:A:1274:GLY:O	1.52	1.08
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:CD1	2.35	1.07
1:A:864:VAL:HG13	1:A:867:LYS:HG3	1.32	1.07
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CD2	2.42	1.07
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:CD2	2.31	1.07
1:A:1135:ARG:HH12	1:A:1137:LYS:HE2	1.18	1.07
1:A:863:GLU:OE1	1:A:864:VAL:HG23	1.56	1.06
1:A:1580:SER:O	1:A:1581:VAL:HG23	1.55	1.06
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:HB3	1.52	1.06
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:N	1.88	1.06
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:HD2	1.34	1.05
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CD2	1.73	1.05
1:A:1791:SER:O	1:A:1792:GLY:C	2.00	1.05
1:A:86:GLY:O	1:A:89:LYS:HG2	1.56	1.05
1:A:95:LEU:N	1:A:96:SER:HB3	1.72	1.04
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:C	1.83	1.04
1:A:1302:LEU:CD1	1:A:1303:GLY:H	1.70	1.04
1:A:1790:LEU:CD1	1:A:1804:CYS:O	2.04	1.04
1:A:1646:LYS:NZ	1:A:1650:ILE:CD1	2.20	1.04
1:A:757:ASN:N	1:A:915:GLN:NE2	1.82	1.03
1:A:193:TYR:OH	1:A:1946:VAL:HG12	1.58	1.02
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:CG	2.02	1.02
1:A:1561:PHE:HE2	1:A:1567:PHE:CG	1.77	1.02
1:A:94:ARG:C	1:A:96:SER:N	2.05	1.01
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:HE3	0.91	1.01
1:A:1135:ARG:HH12	1:A:1137:LYS:CE	1.73	1.01
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1549:SER:C	2.15	1.01
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:CE	2.23	1.01
1:A:1586:ALA:HB3	1:A:1595:THR:HG21	1.38	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:944:CYS:O	1:A:950:GLU:OE2	1.78	1.01
1:A:1095:GLN:HG3	1:A:1123:GLU:CG	1.91	1.01
1:A:1652:GLU:CD	1:A:1653:ALA:N	2.19	1.01
1:A:155:ARG:HH21	1:A:1532:ARG:HG3	0.86	1.00
1:A:1348:TYR:O	1:A:1352:LEU:HB3	1.60	1.00
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:CB	2.33	1.00
1:A:884:LYS:HE3	1:A:895:GLN:HE22	1.21	1.00
1:A:948:PRO:HG2	1:A:949:HIS:CE1	1.96	1.00
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:HG2	1.03	1.00
1:A:1646:LYS:C	1:A:1649:MET:CE	2.32	1.00
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:HD2	1.86	1.00
1:A:1648:GLU:C	1:A:1649:MET:SD	2.44	1.00
1:A:18:LEU:CD1	1:A:146:ILE:HD11	1.90	1.00
1:A:1567:PHE:O	1:A:1567:PHE:CD1	2.14	1.00
1:A:20:GLU:O	1:A:180:ASN:HB3	1.61	0.99
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:HE22	1.23	0.99
1:A:824:GLN:O	1:A:824:GLN:HG2	1.61	0.99
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:CB	1.91	0.99
1:A:1546:ALA:O	1:A:1547:TRP:CD1	2.14	0.99
1:A:1269:PRO:CB	1:A:1275:PHE:CE1	2.45	0.99
1:A:1648:GLU:HB2	1:A:1649:MET:SD	2.02	0.99
1:A:1095:GLN:HG3	1:A:1123:GLU:HG2	1.01	0.99
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:CD	2.29	0.98
1:A:239:GLU:OE1	1:A:240:ARG:N	1.96	0.98
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:CD	1.94	0.98
1:A:1445:SER:OG	1:A:1450:MET:HE3	1.64	0.98
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:NZ	2.26	0.98
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:CE1	2.46	0.98
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:CB	2.41	0.98
1:A:1646:LYS:HZ1	1:A:1650:ILE:HD11	1.17	0.98
1:A:95:LEU:CA	1:A:96:SER:HB3	1.94	0.97
1:A:971:ARG:HB2	1:A:971:ARG:HH21	1.28	0.97
1:A:1556:LEU:HG	1:A:1564:HIS:NE2	1.79	0.97
1:A:1060:ARG:HH11	1:A:1060:ARG:HB3	1.29	0.97
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:NZ	1.78	0.97
1:A:1542:ARG:HH21	1:A:1549:SER:CA	1.66	0.96
1:A:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:HD2	1.29	0.96
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:CD1	2.32	0.96
1:A:1529:LEU:CA	1:A:1534:LEU:HB2	1.95	0.96
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:HG2	1.96	0.96
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1550:THR:N	2.12	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:884:LYS:HE3	1:A:895:GLN:NE2	1.82	0.95
1:A:888:TRP:C	1:A:890:ILE:H	1.71	0.95
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:NE2	1.82	0.95
1:A:969:SER:O	1:A:973:LEU:HD23	1.62	0.95
1:A:1796:LYS:HB2	1:A:1797:PRO:HD2	1.47	0.95
1:A:658:LYS:NZ	1:A:699:GLN:NE2	2.13	0.94
1:A:1512:LYS:HG3	1:A:1513:ALA:H	1.31	0.94
1:A:1474:VAL:HG11	1:A:1585:GLY:O	1.65	0.94
1:A:109:MET:O	1:A:111:PRO:HD3	1.67	0.94
1:A:757:ASN:C	1:A:915:GLN:HE22	1.76	0.94
1:A:1269:PRO:HB3	1:A:1275:PHE:CE1	2.03	0.93
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:HZ1	1.80	0.93
1:A:1095:GLN:CG	1:A:1123:GLU:HG2	1.96	0.93
1:A:1796:LYS:HB2	1:A:1797:PRO:CD	1.97	0.93
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:HD3	1.83	0.93
1:A:1791:SER:O	1:A:1793:PHE:N	2.01	0.93
1:A:79:ASN:ND2	1:A:199:ASN:OD1	2.02	0.93
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:CD	2.42	0.93
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CE1	2.04	0.93
1:A:1530:GLY:C	1:A:1534:LEU:HB3	1.94	0.93
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:CD	2.16	0.93
1:A:871:ARG:HH11	1:A:871:ARG:HG3	1.34	0.92
1:A:1590:LYS:C	1:A:1592:GLY:H	1.75	0.92
1:A:358:HIS:CD2	1:A:360:ALA:HB3	2.03	0.92
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:NE2	2.31	0.92
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:CB	1.54	0.92
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:HB2	2.04	0.92
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CZ	2.05	0.92
1:A:15:GLY:O	1:A:165:VAL:HG12	1.70	0.92
1:A:1304:ARG:HG3	1:A:1432:SER:OG	1.70	0.91
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:HG21	1.70	0.91
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:HD2	1.53	0.91
1:A:355:LEU:O	1:A:356:MET:HE2	1.70	0.91
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:H	1.07	0.91
1:A:1520:VAL:HG12	1:A:1520:VAL:O	1.70	0.91
1:A:94:ARG:HB3	1:A:96:SER:HB2	1.52	0.90
1:A:1519:GLU:H	1:A:1519:GLU:CD	1.78	0.90
1:A:94:ARG:NH2	1:A:97:GLU:OE1	2.04	0.90
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:HG3	1.99	0.90
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:HB2	2.02	0.90
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HZ1	1.19	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1302:LEU:CD1	1:A:1303:GLY:N	2.33	0.89
1:A:1910:ILE:C	1:A:1911:ASP:OD1	2.16	0.89
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:NE2	2.34	0.89
1:A:193:TYR:CD1	1:A:197:ILE:HD11	2.07	0.89
1:A:1529:LEU:HD23	1:A:1533:LEU:HB2	1.55	0.89
1:A:223:ALA:HB1	1:A:839:THR:HB	1.52	0.89
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:HZ1	1.31	0.89
1:A:1457:ASN:N	1:A:1458:PRO:HD2	1.88	0.89
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:CG1	2.21	0.89
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:HD2	1.20	0.89
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:CD	2.37	0.88
1:A:1521:TRP:CZ2	1:A:1555:THR:HG21	2.09	0.88
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:CB	2.22	0.88
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:HB	2.06	0.88
1:A:376:ASN:HD21	1:A:413:PRO:HG2	1.39	0.88
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:CD2	2.27	0.87
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:HZ2	1.37	0.87
1:A:757:ASN:C	1:A:915:GLN:NE2	2.31	0.87
1:A:611:ASN:OD1	1:A:611:ASN:O	1.93	0.87
1:A:1296:ALA:O	1:A:1301:ASP:HB2	1.75	0.87
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:CB	2.04	0.86
1:A:193:TYR:HE1	1:A:197:ILE:HD11	1.06	0.86
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:NZ	2.24	0.86
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:CB	2.04	0.86
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:HB2	1.74	0.86
1:A:1052:MET:CG	1:A:1064:TRP:HH2	1.88	0.86
1:A:1528:LYS:H	1:A:1528:LYS:HD2	1.39	0.86
1:A:1586:ALA:CB	1:A:1595:THR:HG21	2.05	0.86
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:HD3	1.74	0.86
1:A:1303:GLY:O	1:A:1432:SER:CB	2.23	0.86
1:A:1687:SER:OG	1:A:1692:ILE:HD11	1.76	0.86
1:A:1138:SER:O	1:A:1982:PHE:CE2	2.28	0.86
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:HG12	1.76	0.86
1:A:1519:GLU:CD	1:A:1519:GLU:N	2.32	0.86
1:A:1365:ILE:O	1:A:1368:ASN:O	1.94	0.85
1:A:887:MET:O	1:A:888:TRP:C	2.20	0.85
1:A:1516:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:HD23	1.55	0.85
1:A:1694:ARG:HH12	1:A:1816:ARG:HG2	1.38	0.85
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CG	2.54	0.85
1:A:1538:TRP:HE1	1:A:1550:THR:HG22	1.40	0.85
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:HD2	2.06	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1542:ARG:HH21	1:A:1549:SER:HA	0.75	0.84
1:A:361:TYR:CE2	1:A:597:GLU:HA	2.12	0.84
1:A:1622:ARG:HB2	1:A:1650:ILE:HG21	1.59	0.84
1:A:389:ASP:O	1:A:390:ILE:HD13	1.78	0.84
1:A:742:ASN:OD1	1:A:743:LEU:N	2.10	0.84
1:A:1529:LEU:C	1:A:1534:LEU:HB2	2.03	0.84
1:A:94:ARG:C	1:A:96:SER:H	1.84	0.84
1:A:971:ARG:HH21	1:A:971:ARG:CB	1.90	0.84
1:A:757:ASN:CA	1:A:915:GLN:HE21	1.91	0.83
1:A:365:TRP:CG	1:A:595:LEU:HD11	2.13	0.83
1:A:1810:GLU:OE1	1:A:1814:ARG:NH2	2.11	0.83
1:A:208:MET:C	1:A:210:ALA:H	1.81	0.83
1:A:757:ASN:CA	1:A:915:GLN:NE2	2.40	0.83
1:A:155:ARG:HB2	1:A:155:ARG:CZ	2.07	0.83
1:A:380:VAL:HG23	1:A:411:PHE:CE1	2.11	0.83
1:A:1520:VAL:O	1:A:1520:VAL:CG1	2.27	0.83
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:HD13	2.13	0.82
1:A:1456:LEU:O	1:A:1459:ASN:HB2	1.79	0.82
1:A:493:MET:HE1	1:A:1296:ALA:HB2	1.59	0.82
1:A:1798:ALA:O	1:A:1800:ARG:N	2.13	0.82
1:A:671:MET:HG2	1:A:1180:GLU:OE1	1.79	0.82
1:A:671:MET:HE3	1:A:1180:GLU:OE1	1.79	0.82
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:CD	2.25	0.82
1:A:1136:PRO:HG2	1:A:1982:PHE:HB2	1.62	0.82
1:A:15:GLY:HA2	1:A:163:PRO:HG2	1.60	0.82
1:A:1562:LEU:HD23	1:A:1563:SER:HB3	1.62	0.82
1:A:1582:ARG:O	1:A:1583:LEU:HB3	1.78	0.82
1:A:348:THR:C	1:A:350:SER:H	1.80	0.81
1:A:155:ARG:NH2	1:A:1532:ARG:CG	2.29	0.81
1:A:1646:LYS:HZ2	1:A:1650:ILE:HD11	1.00	0.81
1:A:1911:ASP:OD1	1:A:1911:ASP:N	2.13	0.81
1:A:1579:ARG:HG2	1:A:1580:SER:H	1.44	0.81
1:A:384:PRO:CG	1:A:405:LYS:CE	2.58	0.81
1:A:1529:LEU:CD2	1:A:1533:LEU:HB2	2.10	0.81
1:A:883:GLU:HB2	1:A:1355:MET:CE	2.07	0.81
1:A:1392:SER:CB	1:A:1393:PRO:CD	2.30	0.81
1:A:29:ASP:O	1:A:31:PRO:HD2	1.81	0.81
1:A:1547:TRP:CE2	1:A:1560:PRO:HD2	2.16	0.81
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:HG2	2.04	0.81
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:HD2	1.63	0.81
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:699:GLN:NE2	1.76	0.80

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1519:GLU:C	1:A:1522:PHE:H	1.89	0.80
1:A:1531:PRO:O	1:A:1535:LYS:CB	2.26	0.80
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:HD11	2.10	0.80
1:A:1791:SER:N	1:A:1796:LYS:HE3	1.94	0.80
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:HD3	1.81	0.80
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:N	2.15	0.80
1:A:1400:SER:HB2	1:A:1407:ARG:NH1	1.97	0.80
1:A:380:VAL:HG12	1:A:380:VAL:O	1.80	0.80
1:A:888:TRP:C	1:A:890:ILE:N	2.40	0.80
1:A:658:LYS:CE	1:A:699:GLN:HE22	1.94	0.80
1:A:883:GLU:CB	1:A:1355:MET:HE2	2.07	0.80
1:A:1062:VAL:HG11	1:A:1064:TRP:CZ3	2.16	0.80
1:A:1568:ARG:O	1:A:1572:ALA:HB2	1.80	0.80
1:A:18:LEU:HD11	1:A:146:ILE:HD11	1.62	0.80
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:H	1.90	0.80
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:HB2	2.12	0.79
1:A:944:CYS:CA	1:A:950:GLU:OE2	2.29	0.79
1:A:1062:VAL:CG1	1:A:1064:TRP:CE3	2.40	0.79
1:A:22:GLY:O	1:A:178:LEU:HD12	1.81	0.79
1:A:405:LYS:NZ	1:A:405:LYS:HB2	1.97	0.79
1:A:1474:VAL:HG12	1:A:1585:GLY:O	1.78	0.79
1:A:824:GLN:O	1:A:824:GLN:CG	2.30	0.79
1:A:1555:THR:OG1	1:A:1564:HIS:HE1	1.65	0.79
1:A:561:SER:O	1:A:603:THR:HG21	1.83	0.79
1:A:193:TYR:OH	1:A:1946:VAL:CG1	2.30	0.79
1:A:948:PRO:HG2	1:A:949:HIS:ND1	1.97	0.79
1:A:1556:LEU:HD12	1:A:1564:HIS:NE2	1.97	0.79
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:CE3	2.17	0.78
1:A:30:ARG:NH2	1:A:820:ARG:O	2.16	0.78
1:A:1970:GLU:CD	1:A:1970:GLU:H	1.91	0.78
1:A:236:PRO:CB	1:A:238:ILE:HD11	2.12	0.78
1:A:1052:MET:HG2	1:A:1064:TRP:CH2	2.18	0.78
1:A:1590:LYS:C	1:A:1592:GLY:N	2.36	0.78
1:A:1731:ASP:OD1	1:A:1731:ASP:O	2.00	0.78
1:A:87:LEU:C	1:A:89:LYS:N	2.40	0.78
1:A:87:LEU:H	1:A:87:LEU:HD12	1.48	0.78
1:A:95:LEU:N	1:A:96:SER:CB	2.46	0.78
1:A:864:VAL:HG13	1:A:867:LYS:CG	2.13	0.78
1:A:1512:LYS:HG3	1:A:1513:ALA:N	1.99	0.78
1:A:944:CYS:HA	1:A:950:GLU:OE2	1.83	0.78
1:A:1433:THR:HB	1:A:1434:GLN:O	1.84	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1561:PHE:HE2	1:A:1567:PHE:CD2	2.01	0.78
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:CB	2.30	0.78
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:NZ	1.90	0.77
1:A:1534:LEU:HD22	1:A:1534:LEU:O	1.84	0.77
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:OE1	2.03	0.77
1:A:1646:LYS:CA	1:A:1649:MET:HE1	2.14	0.77
1:A:161:GLU:O	1:A:162:ASN:C	2.28	0.77
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:CB	2.32	0.77
1:A:1646:LYS:HZ2	1:A:1650:ILE:CD1	1.89	0.77
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD23	1.50	0.76
1:A:676:SER:OG	1:A:1174:ASN:ND2	2.18	0.76
1:A:944:CYS:C	1:A:950:GLU:OE2	2.28	0.76
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:HG11	1.85	0.76
1:A:756:LYS:HB3	1:A:1204:GLN:HE21	1.50	0.76
1:A:871:ARG:HG3	1:A:871:ARG:NH1	2.00	0.76
1:A:1567:PHE:CD1	1:A:1570:PHE:HB3	2.21	0.76
1:A:1455:SER:C	1:A:1458:PRO:CG	2.57	0.76
1:A:1646:LYS:HZ1	1:A:1650:ILE:CD1	1.89	0.76
1:A:1060:ARG:HB3	1:A:1060:ARG:NH1	2.00	0.76
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:CB	2.33	0.75
1:A:87:LEU:C	1:A:89:LYS:H	1.87	0.75
1:A:887:MET:O	1:A:888:TRP:O	2.02	0.75
1:A:1061:GLU:OE2	1:A:1061:GLU:N	2.18	0.75
1:A:236:PRO:HB2	1:A:238:ILE:HD12	1.66	0.75
1:A:1519:GLU:N	1:A:1519:GLU:OE1	2.13	0.75
1:A:1514:GLU:HB2	1:A:1571:ILE:HG22	1.68	0.75
1:A:365:TRP:HE1	1:A:595:LEU:HD12	0.94	0.75
1:A:1597:ILE:HG22	1:A:1597:ILE:O	1.87	0.75
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:N	2.20	0.74
1:A:20:GLU:O	1:A:180:ASN:CB	2.35	0.74
1:A:1116:SER:O	1:A:1134:ILE:HG22	1.87	0.74
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:HD2	1.96	0.74
1:A:354:SER:O	1:A:355:LEU:C	2.30	0.74
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1790:LEU:H	1.52	0.74
1:A:87:LEU:HD12	1:A:87:LEU:N	2.01	0.74
1:A:1390:VAL:O	1:A:1395:VAL:HG13	1.86	0.74
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:HB2	1.87	0.74
1:A:1646:LYS:HE3	1:A:1650:ILE:HG13	1.68	0.74
1:A:1976:LEU:N	1:A:1976:LEU:HD23	2.03	0.74
1:A:474:TYR:O	1:A:480:GLN:NE2	2.20	0.74
1:A:671:MET:SD	1:A:1180:GLU:OE1	2.46	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1694:ARG:NH1	1:A:1816:ARG:HG2	2.02	0.74
1:A:663:ILE:O	1:A:666:THR:OG1	2.04	0.74
1:A:1403:HIS:O	1:A:1406:PRO:CD	2.32	0.74
1:A:358:HIS:NE2	1:A:360:ALA:HB3	2.03	0.74
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:699:GLN:CD	1.90	0.74
1:A:888:TRP:O	1:A:891:ASP:OD1	2.04	0.74
1:A:1066:ASP:N	1:A:1066:ASP:OD1	2.21	0.74
1:A:1459:ASN:HB3	1:A:1460:GLN:HE22	1.52	0.74
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:CD	2.31	0.74
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD22	1.67	0.74
1:A:732:THR:OG1	1:A:746:MET:SD	2.45	0.73
1:A:1455:SER:HA	1:A:1458:PRO:HG3	1.70	0.73
1:A:1537:GLU:OE1	1:A:1537:GLU:HA	1.88	0.73
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1303:GLY:CA	2.17	0.73
1:A:872:SER:O	1:A:873:LYS:C	2.31	0.73
1:A:1136:PRO:HG2	1:A:1982:PHE:CB	2.17	0.73
1:A:1574:VAL:CA	1:A:1575:ASP:HB2	2.16	0.73
1:A:1648:GLU:CB	1:A:1649:MET:SD	2.76	0.73
1:A:843:LEU:O	1:A:844:ASP:HB3	1.88	0.73
1:A:982:SER:HB2	1:A:1153:LEU:HD21	1.70	0.73
1:A:1796:LYS:CB	1:A:1797:PRO:CD	2.66	0.73
1:A:1344:ASP:HB3	1:A:1398:SER:HB3	1.71	0.73
1:A:1302:LEU:CG	1:A:1303:GLY:H	2.02	0.73
1:A:95:LEU:H	1:A:96:SER:HB3	1.52	0.73
1:A:1547:TRP:CZ2	1:A:1560:PRO:HD2	2.24	0.73
1:A:1646:LYS:CA	1:A:1649:MET:CE	2.67	0.73
1:A:239:GLU:OE1	1:A:239:GLU:N	2.22	0.73
1:A:1646:LYS:HA	1:A:1649:MET:CE	2.19	0.73
1:A:1910:ILE:HD12	1:A:1910:ILE:N	2.03	0.72
1:A:905:CYS:HB3	1:A:1023:ARG:O	1.89	0.72
1:A:238:ILE:HD12	1:A:238:ILE:N	2.04	0.72
1:A:421:GLN:NE2	1:A:421:GLN:HA	2.04	0.72
1:A:874:LEU:HG	1:A:874:LEU:O	1.90	0.72
1:A:1137:LYS:HE3	1:A:1137:LYS:HA	1.70	0.72
1:A:1791:SER:HB2	1:A:1796:LYS:HZ2	1.53	0.72
1:A:323:THR:O	1:A:454:LEU:HD23	1.90	0.72
1:A:1645:TYR:O	1:A:1649:MET:HE1	1.89	0.72
1:A:1646:LYS:HE3	1:A:1650:ILE:CG1	2.19	0.72
1:A:30:ARG:NH1	1:A:30:ARG:HG2	2.05	0.72
1:A:978:ILE:HB	1:A:1134:ILE:O	1.90	0.72
1:A:1582:ARG:O	1:A:1583:LEU:CB	2.35	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3:LEU:CD1	1:A:87:LEU:O	2.35	0.72
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HE2	1.69	0.72
1:A:376:ASN:HD21	1:A:413:PRO:CG	2.03	0.72
1:A:1534:LEU:HD13	1:A:1534:LEU:C	2.14	0.72
1:A:951:THR:HG21	1:A:1181:TYR:OH	1.89	0.71
1:A:369:LEU:O	1:A:369:LEU:HD22	1.90	0.71
1:A:1474:VAL:HG21	1:A:1584:LEU:HG	1.72	0.71
1:A:3:LEU:C	1:A:7:CYS:SG	2.72	0.71
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:HB3	1.72	0.71
1:A:193:TYR:CE2	1:A:1946:VAL:HG11	2.24	0.71
1:A:1457:ASN:N	1:A:1458:PRO:CD	2.52	0.71
1:A:30:ARG:HG2	1:A:30:ARG:HH11	1.56	0.71
1:A:1357:LEU:HG	1:A:1357:LEU:O	1.89	0.71
1:A:1580:SER:O	1:A:1581:VAL:CG2	2.38	0.71
1:A:1650:ILE:N	1:A:1650:ILE:HD13	2.06	0.71
1:A:1790:LEU:HD11	1:A:1804:CYS:O	1.91	0.71
1:A:462:PHE:O	1:A:466:ASN:ND2	2.23	0.71
1:A:217:SER:HB2	1:A:221:LEU:HG	1.72	0.71
1:A:1868:ASN:C	1:A:1870:ASP:H	1.98	0.71
1:A:1567:PHE:HD1	1:A:1570:PHE:HB3	1.54	0.71
1:A:349:ASP:O	1:A:350:SER:C	2.29	0.70
1:A:94:ARG:O	1:A:96:SER:N	2.24	0.70
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CG	2.79	0.70
1:A:381:VAL:O	1:A:382:SER:C	2.33	0.70
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CG	2.21	0.70
1:A:361:TYR:HE2	1:A:597:GLU:HA	1.55	0.70
1:A:1656:THR:O	1:A:1657:LEU:C	2.33	0.70
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CD	2.21	0.70
1:A:347:LYS:HD2	1:A:348:THR:O	1.92	0.70
1:A:1574:VAL:N	1:A:1575:ASP:HB2	2.07	0.70
1:A:380:VAL:HG21	1:A:411:PHE:HE1	0.88	0.70
1:A:383:ASP:OD2	1:A:386:LYS:HE3	1.92	0.70
1:A:1459:ASN:HB3	1:A:1460:GLN:NE2	2.07	0.70
1:A:1973:GLU:HB3	1:A:1976:LEU:HD21	1.73	0.70
1:A:1751:ARG:HE	1:A:1783:ARG:HH12	1.40	0.69
1:A:335:TRP:CE2	1:A:594:GLU:OE1	2.45	0.69
1:A:1140:MET:O	1:A:1143:VAL:CG1	2.41	0.69
1:A:170:ILE:CD1	1:A:181:MET:CB	2.70	0.69
1:A:252:MET:HE3	1:A:789:GLY:HA3	1.74	0.69
1:A:671:MET:CG	1:A:1180:GLU:OE1	2.40	0.69
1:A:1474:VAL:CG2	1:A:1584:LEU:HG	2.22	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:726:ARG:HD3	1:A:1189:ARG:HH11	1.56	0.69
1:A:1052:MET:HG3	1:A:1064:TRP:HH2	1.55	0.69
1:A:1459:ASN:O	1:A:1461:GLU:HG3	1.92	0.69
1:A:1516:LEU:CD1	1:A:1541:LEU:HD22	2.18	0.69
1:A:1551:ASP:O	1:A:1555:THR:CG2	2.31	0.69
1:A:1475:CYS:O	1:A:1584:LEU:HD12	1.92	0.69
1:A:1512:LYS:CG	1:A:1513:ALA:H	2.05	0.69
1:A:1529:LEU:C	1:A:1534:LEU:CB	2.66	0.69
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:CB	2.41	0.69
1:A:1751:ARG:HH11	1:A:1783:ARG:HH22	1.40	0.69
1:A:1758:LEU:O	1:A:1762:ILE:HG12	1.93	0.69
1:A:1937:LEU:CD2	1:A:2028:LYS:CE	2.60	0.69
1:A:94:ARG:HB3	1:A:96:SER:CB	2.23	0.69
1:A:303:GLU:OE2	1:A:684:GLN:NE2	2.26	0.69
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HZ3	1.91	0.69
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:CG	2.28	0.69
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:H	1.58	0.68
1:A:1646:LYS:HA	1:A:1649:MET:HE3	1.75	0.68
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:HD3	1.93	0.68
1:A:1524:LEU:O	1:A:1524:LEU:HD12	1.93	0.68
1:A:1556:LEU:CG	1:A:1564:HIS:CD2	2.72	0.68
1:A:170:ILE:HD11	1:A:181:MET:HB2	1.72	0.68
1:A:1269:PRO:HB3	1:A:1275:PHE:CD1	2.29	0.68
1:A:1528:LYS:H	1:A:1528:LYS:CD	2.00	0.68
1:A:1518:SER:C	1:A:1522:PHE:HB2	2.18	0.68
1:A:921:GLU:OE2	1:A:923:TYR:OH	2.09	0.68
1:A:1774:ILE:HD12	1:A:1774:ILE:H	1.59	0.68
1:A:2:ASN:HB3	1:A:5:VAL:HG22	1.75	0.68
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:CG	2.06	0.68
1:A:1789:ARG:O	1:A:1796:LYS:HG2	1.93	0.68
1:A:1153:LEU:CD2	1:A:1173:VAL:HG13	2.24	0.68
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:CB	2.77	0.68
1:A:1648:GLU:CA	1:A:1649:MET:SD	2.82	0.68
1:A:193:TYR:CE2	1:A:1946:VAL:CG1	2.77	0.67
1:A:622:PHE:HZ	1:A:748:ASN:HD22	1.42	0.67
1:A:734:HIS:CD2	1:A:741:THR:HG21	2.29	0.67
1:A:239:GLU:OE1	1:A:240:ARG:HG2	1.93	0.67
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:NZ	2.09	0.67
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:HB2	1.93	0.67
1:A:884:LYS:CE	1:A:895:GLN:HE22	2.04	0.67
1:A:297:LEU:HD21	1:A:717:PRO:HD3	1.77	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2028:LYS:HD3	1:A:2032:ARG:NH2	2.08	0.67
1:A:354:SER:C	1:A:355:LEU:O	2.23	0.67
1:A:1269:PRO:CB	1:A:1275:PHE:CD1	2.78	0.67
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:CD2	2.25	0.67
1:A:842:ILE:N	1:A:842:ILE:HD12	2.09	0.67
1:A:193:TYR:HH	1:A:1946:VAL:HG12	1.56	0.67
1:A:389:ASP:OD2	1:A:1344:ASP:OD2	2.13	0.67
1:A:671:MET:CE	1:A:1180:GLU:OE1	2.42	0.67
1:A:884:LYS:CE	1:A:895:GLN:NE2	2.58	0.67
1:A:1458:PRO:HG2	1:A:1458:PRO:O	1.95	0.67
1:A:208:MET:C	1:A:210:ALA:N	2.49	0.66
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:CD	2.69	0.66
1:A:4:GLU:HA	1:A:7:CYS:SG	2.35	0.66
1:A:387:GLU:HB3	1:A:388:LEU:HD23	1.76	0.66
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:N	2.10	0.66
1:A:2015:MET:HE1	1:A:2041:MET:HB2	1.78	0.66
1:A:676:SER:OG	1:A:1174:ASN:CG	2.39	0.66
1:A:1645:TYR:O	1:A:1649:MET:CE	2.42	0.66
1:A:97:GLU:O	1:A:99:PHE:N	2.29	0.66
1:A:238:ILE:O	1:A:238:ILE:CG2	2.39	0.66
1:A:669:THR:HG21	1:A:706:HIS:HE1	1.60	0.66
1:A:18:LEU:HD13	1:A:146:ILE:HD11	1.78	0.66
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:CA	2.25	0.66
1:A:1567:PHE:O	1:A:1568:ARG:CA	2.44	0.66
1:A:248:SER:OG	1:A:1022:ARG:NH1	2.28	0.66
1:A:973:LEU:C	1:A:974:GLY:O	2.31	0.66
1:A:1052:MET:CG	1:A:1064:TRP:CH2	2.73	0.66
1:A:1649:MET:CE	1:A:1649:MET:H	2.08	0.66
1:A:917:GLY:C	1:A:920:ARG:HD3	2.18	0.65
1:A:1516:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:HD21	1.76	0.65
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:CA	2.44	0.65
1:A:1069:ARG:HD2	1:A:1071:TYR:OH	1.95	0.65
1:A:1399:LEU:O	1:A:1399:LEU:HD22	1.97	0.65
1:A:405:LYS:HZ2	1:A:405:LYS:HB2	1.59	0.65
1:A:1547:TRP:HB2	1:A:1558:ASP:HB3	1.77	0.65
1:A:1555:THR:OG1	1:A:1564:HIS:CE1	2.49	0.65
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CG	2.15	0.65
1:A:1344:ASP:CB	1:A:1398:SER:HB3	2.26	0.65
1:A:1538:TRP:NE1	1:A:1550:THR:HG22	2.11	0.65
1:A:1579:ARG:HG2	1:A:1580:SER:N	2.12	0.65
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:HG2	1.62	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HE2	1.94	0.65
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:CB	2.10	0.65
1:A:1399:LEU:O	1:A:1399:LEU:HD13	1.97	0.65
1:A:835:ARG:O	1:A:840:LYS:NZ	2.30	0.64
1:A:1455:SER:O	1:A:1458:PRO:HD2	1.90	0.64
1:A:872:SER:O	1:A:874:LEU:N	2.31	0.64
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:HB2	1.79	0.64
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:CA	2.11	0.64
1:A:1694:ARG:HH12	1:A:1816:ARG:CG	2.08	0.64
1:A:208:MET:O	1:A:210:ALA:N	2.26	0.64
1:A:236:PRO:HG3	1:A:1012:ARG:HB3	1.78	0.64
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:HB2	2.27	0.64
1:A:371:ASP:HB3	1:A:376:ASN:HD22	1.63	0.64
1:A:381:VAL:O	1:A:381:VAL:HG23	1.97	0.64
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:HD3	0.66	0.64
1:A:1458:PRO:HA	1:A:1461:GLU:OE2	1.98	0.64
1:A:193:TYR:CD1	1:A:197:ILE:CD1	2.74	0.64
1:A:1137:LYS:NZ	1:A:1137:LYS:HB2	2.13	0.64
1:A:1183:SER:OG	1:A:1197:ARG:NH1	2.31	0.64
1:A:1517:VAL:HG21	1:A:1571:ILE:HD13	1.79	0.64
1:A:18:LEU:CD1	1:A:146:ILE:CD1	2.72	0.63
1:A:23:LEU:HD13	1:A:178:LEU:HB2	1.78	0.63
1:A:380:VAL:CG2	1:A:411:PHE:CD1	2.73	0.63
1:A:1062:VAL:HG12	1:A:1064:TRP:HE3	1.59	0.63
1:A:2028:LYS:HD3	1:A:2032:ARG:HH21	1.63	0.63
1:A:1046:ASP:HB3	1:A:1047:PRO:HD3	1.80	0.63
1:A:1516:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:CD2	2.18	0.63
1:A:1635:MET:HG3	1:A:1638:ASN:HB2	1.80	0.63
1:A:493:MET:CE	1:A:1296:ALA:HB2	2.28	0.63
1:A:22:GLY:O	1:A:178:LEU:CD1	2.46	0.63
1:A:202:TYR:OH	1:A:206:ARG:NH2	2.31	0.63
1:A:1024:LYS:HG2	1:A:1074:THR:O	1.99	0.63
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:HB3	1.98	0.63
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:CG	2.29	0.63
1:A:1521:TRP:CH2	1:A:1555:THR:HG21	2.33	0.63
1:A:1790:LEU:HD13	1:A:1804:CYS:HB3	1.80	0.62
1:A:905:CYS:SG	1:A:1023:ARG:NH1	2.72	0.62
1:A:1790:LEU:HD12	1:A:1790:LEU:N	2.13	0.62
1:A:1929:LYS:HE2	1:A:2005:TYR:O	1.98	0.62
1:A:742:ASN:CG	1:A:743:LEU:N	2.57	0.62
1:A:1275:PHE:HE2	1:A:1277:LEU:HD21	1.65	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:965:HIS:ND1	1:A:1120:ASP:OD2	2.33	0.62
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:HG2	1.99	0.62
1:A:99:PHE:H	1:A:100:PRO:HD3	1.64	0.62
1:A:193:TYR:CZ	1:A:1946:VAL:CG1	2.82	0.62
1:A:384:PRO:HD3	1:A:405:LYS:HE3	1.81	0.62
1:A:1046:ASP:OD1	1:A:1046:ASP:C	2.43	0.62
1:A:1265:LEU:CD1	1:A:1274:GLY:O	2.38	0.62
1:A:1308:TYR:HD2	1:A:1324:ARG:HH11	1.46	0.62
1:A:84:PHE:CB	1:A:88:SER:OG	2.48	0.62
1:A:1561:PHE:CE1	1:A:1570:PHE:CD2	2.88	0.62
1:A:101:ILE:HG22	1:A:156:ARG:HB3	1.81	0.62
1:A:162:ASN:OD1	1:A:1766:ARG:NH2	2.33	0.62
1:A:1840:GLN:NE2	1:A:1841:GLU:OE2	2.32	0.62
1:A:193:TYR:CZ	1:A:1946:VAL:HG12	2.34	0.62
1:A:1552:PRO:O	1:A:1564:HIS:CE1	2.53	0.62
1:A:860:LEU:HB2	1:A:863:GLU:HB2	1.82	0.61
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:HB2	1.82	0.61
1:A:238:ILE:CD1	1:A:238:ILE:N	2.62	0.61
1:A:238:ILE:O	1:A:238:ILE:HG22	1.88	0.61
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:HG3	1.82	0.61
1:A:849:LYS:HB3	1:A:874:LEU:HD22	1.82	0.61
1:A:1207:GLU:HA	1:A:1207:GLU:OE1	1.99	0.61
1:A:840:LYS:C	1:A:842:ILE:HD12	2.25	0.61
1:A:1538:TRP:HA	1:A:1538:TRP:CE3	2.35	0.61
1:A:1740:GLY:HA3	1:A:1745:ASN:HA	1.81	0.61
1:A:545:LYS:C	1:A:546:LEU:O	2.34	0.61
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:N	1.98	0.61
1:A:30:ARG:HH11	1:A:30:ARG:CG	2.14	0.61
1:A:967:LEU:HD23	1:A:1988:LEU:HD11	1.82	0.61
1:A:355:LEU:O	1:A:356:MET:HB2	2.00	0.61
1:A:1064:TRP:HE1	1:A:1072:ILE:HG12	1.64	0.61
1:A:694:LEU:O	1:A:694:LEU:HD23	1.99	0.61
1:A:1091:HIS:NE2	1:A:1128:SER:OG	2.27	0.61
1:A:87:LEU:HD13	1:A:88:SER:H	1.65	0.61
1:A:239:GLU:CD	1:A:239:GLU:H	2.08	0.61
1:A:916:HIS:O	1:A:920:ARG:NE	2.34	0.61
1:A:1067:LYS:HD2	1:A:1068:GLY:N	2.14	0.61
1:A:1435:LYS:H	1:A:1438:LEU:HD12	1.65	0.61
1:A:1547:TRP:CZ3	1:A:1559:GLY:O	2.54	0.61
1:A:1153:LEU:HD23	1:A:1173:VAL:HG13	1.82	0.60
1:A:1868:ASN:O	1:A:1870:ASP:N	2.34	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:917:GLY:N	1:A:920:ARG:HD2	2.15	0.60
1:A:1670:ARG:HH12	1:A:1853:ARG:H	1.49	0.60
1:A:237:ASN:O	1:A:241:VAL:CB	2.48	0.60
1:A:1574:VAL:HG13	1:A:1575:ASP:N	2.16	0.60
1:A:1688:ILE:HG22	1:A:1690:ASP:H	1.66	0.60
1:A:1180:GLU:CG	1:A:1185:PHE:HD1	2.14	0.60
1:A:721:ILE:C	1:A:727:VAL:HG23	2.24	0.60
1:A:351:GLY:CA	1:A:369:LEU:HD12	2.29	0.60
1:A:916:HIS:C	1:A:920:ARG:CD	2.74	0.60
1:A:1160:ASN:OD1	1:A:1161:PRO:HD3	2.02	0.60
1:A:1400:SER:HB2	1:A:1407:ARG:CZ	2.32	0.60
1:A:1514:GLU:HB2	1:A:1571:ILE:CG2	2.32	0.60
1:A:1973:GLU:CG	1:A:1976:LEU:HD21	2.32	0.60
1:A:353:GLY:HA3	1:A:355:LEU:H	1.66	0.59
1:A:838:GLY:HA3	1:A:890:ILE:HD13	1.83	0.59
1:A:1546:ALA:O	1:A:1547:TRP:CG	2.55	0.59
1:A:1574:VAL:HG22	1:A:1574:VAL:O	2.01	0.59
1:A:96:SER:OG	1:A:99:PHE:CE1	2.56	0.59
1:A:1456:LEU:C	1:A:1458:PRO:HD2	2.27	0.59
1:A:1790:LEU:CD1	1:A:1804:CYS:HB3	2.33	0.59
1:A:947:SER:OG	1:A:950:GLU:OE2	2.19	0.59
1:A:87:LEU:HD13	1:A:88:SER:N	2.17	0.59
1:A:1567:PHE:CE1	1:A:1571:ILE:N	2.70	0.59
1:A:1677:LEU:O	1:A:1678:SER:C	2.44	0.59
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:N	2.18	0.59
1:A:411:PHE:O	1:A:412:LYS:HE2	2.02	0.59
1:A:840:LYS:C	1:A:842:ILE:CD1	2.75	0.59
1:A:1180:GLU:HG3	1:A:1185:PHE:HD1	1.68	0.59
1:A:1556:LEU:C	1:A:1558:ASP:H	2.09	0.59
1:A:1441:LEU:HD21	1:A:1541:LEU:HD13	1.84	0.59
1:A:210:ALA:O	1:A:211:ASP:C	2.43	0.58
1:A:361:TYR:O	1:A:365:TRP:HD1	1.86	0.58
1:A:1010:PHE:O	1:A:1014:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:CG	2.50	0.58
1:A:1563:SER:HG	1:A:1566:GLN:H	1.51	0.58
1:A:1622:ARG:HH22	1:A:1674:LEU:HB3	1.68	0.58
1:A:1791:SER:HB2	1:A:1796:LYS:NZ	2.16	0.58
1:A:1927:LEU:HA	1:A:1930:GLN:HB2	1.83	0.58
1:A:973:LEU:O	1:A:974:GLY:C	2.46	0.58
1:A:1478:LEU:O	1:A:1478:LEU:HD12	2.03	0.58
1:A:1527:THR:O	1:A:1527:THR:HG22	2.01	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CB	2.81	0.58
1:A:979:ASN:OD1	1:A:1133:SER:OG	2.19	0.58
1:A:1446:SER:HA	1:A:1450:MET:HB2	1.85	0.58
1:A:658:LYS:HZ1	1:A:696:THR:H	1.51	0.58
1:A:685:LYS:HD2	1:A:1169:GLU:HB3	1.86	0.58
1:A:1138:SER:HB3	1:A:1141:ASP:HB3	1.84	0.58
1:A:1926:SER:OG	1:A:2008:LYS:NZ	2.37	0.58
1:A:1215:GLN:NE2	1:A:1275:PHE:O	2.23	0.58
1:A:1567:PHE:CG	1:A:1567:PHE:O	2.56	0.58
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:O	2.02	0.58
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CD2	2.83	0.58
1:A:1569:ASN:HA	1:A:1572:ALA:HB3	1.86	0.58
1:A:371:ASP:CB	1:A:376:ASN:HD22	2.16	0.58
1:A:1138:SER:O	1:A:1982:PHE:CD2	2.57	0.58
1:A:1553:SER:O	1:A:1556:LEU:HB2	2.04	0.58
1:A:1556:LEU:CD2	1:A:1563:SER:C	2.76	0.58
1:A:244:THR:O	1:A:1023:ARG:NH2	2.35	0.57
1:A:837:ILE:HD11	1:A:935:GLY:HA2	1.86	0.57
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:CB	2.81	0.57
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:HD21	1.86	0.57
1:A:102:THR:HG23	1:A:160:MET:SD	2.44	0.57
1:A:238:ILE:CD1	1:A:238:ILE:H	2.18	0.57
1:A:20:GLU:C	1:A:180:ASN:HB3	2.29	0.57
1:A:951:THR:OG1	1:A:958:LYS:HB3	2.04	0.57
1:A:1180:GLU:HG2	1:A:1185:PHE:CD1	2.39	0.57
1:A:835:ARG:O	1:A:839:THR:OG1	2.21	0.57
1:A:1003:CYS:HB3	1:A:1011:HIS:CD2	2.40	0.57
1:A:234:PHE:CZ	1:A:236:PRO:O	2.58	0.57
1:A:402:LYS:O	1:A:405:LYS:HG3	2.03	0.57
1:A:1004:TRP:HD1	1:A:1005:PHE:CD1	2.23	0.57
1:A:1561:PHE:CE1	1:A:1570:PHE:CG	2.93	0.57
1:A:351:GLY:HA3	1:A:369:LEU:HD11	0.66	0.57
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1570:PHE:HB3	2.39	0.57
1:A:354:SER:O	1:A:356:MET:N	2.37	0.57
1:A:1548:LEU:HD22	1:A:1555:THR:HG22	1.86	0.57
1:A:1694:ARG:NH2	1:A:1816:ARG:HG2	2.19	0.57
1:A:1304:ARG:HG2	1:A:1432:SER:HB3	1.84	0.57
1:A:1925:GLY:O	1:A:1928:ARG:NE	2.38	0.57
1:A:235:GLU:H	1:A:236:PRO:HD3	1.69	0.56
1:A:1831:ASP:O	1:A:1832:ILE:HG12	2.05	0.56
1:A:11:ASN:CG	1:A:12:VAL:N	2.62	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:410:ARG:O	1:A:411:PHE:C	2.48	0.56
1:A:411:PHE:CD1	1:A:411:PHE:N	2.73	0.56
1:A:825:TRP:H	1:A:825:TRP:CD1	2.22	0.56
1:A:987:LYS:HG2	1:A:988:LYS:HG3	1.88	0.56
1:A:1920:ARG:HD3	1:A:1924:GLU:HB2	1.87	0.56
1:A:1291:PHE:HD2	1:A:1450:MET:HG2	1.70	0.56
1:A:1791:SER:CB	1:A:1796:LYS:NZ	2.68	0.56
1:A:658:LYS:HZ2	1:A:699:GLN:CG	2.15	0.56
1:A:10:ILE:CG1	1:A:11:ASN:N	2.68	0.56
1:A:1456:LEU:N	1:A:1458:PRO:HD2	2.20	0.56
1:A:1529:LEU:HB3	1:A:1534:LEU:CB	2.36	0.56
1:A:1649:MET:C	1:A:1650:ILE:HD13	2.30	0.56
1:A:1946:VAL:HG23	1:A:1946:VAL:O	2.04	0.56
1:A:25:ASP:N	1:A:25:ASP:OD1	2.36	0.56
1:A:1552:PRO:O	1:A:1564:HIS:NE2	2.39	0.56
1:A:1624:GLU:HG3	1:A:1858:SER:H	1.70	0.56
1:A:389:ASP:O	1:A:390:ILE:CD1	2.52	0.56
1:A:540:GLU:N	1:A:540:GLU:OE1	2.38	0.56
1:A:1720:LYS:NZ	1:A:1742:GLY:O	2.39	0.56
1:A:94:ARG:O	1:A:95:LEU:C	2.48	0.56
1:A:1122:ILE:O	1:A:1122:ILE:HG23	2.06	0.56
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:O	2.06	0.56
1:A:851:THR:HG21	1:A:927:ALA:HB2	1.88	0.56
1:A:1290:ARG:HH21	1:A:1576:ALA:HB3	1.70	0.56
1:A:1797:PRO:O	1:A:1798:ALA:O	2.25	0.55
1:A:209:ASP:OD1	1:A:209:ASP:N	2.20	0.55
1:A:864:VAL:HG11	1:A:867:LYS:CB	2.36	0.55
1:A:1091:HIS:HE2	1:A:1128:SER:HG	1.53	0.55
1:A:760:GLU:OE1	1:A:871:ARG:NH2	2.39	0.55
1:A:995:THR:HG21	1:A:1021:PHE:HB2	1.88	0.55
1:A:1649:MET:HE2	1:A:1649:MET:H	1.71	0.55
1:A:952:VAL:O	1:A:952:VAL:HG22	2.05	0.55
1:A:378:GLU:HB2	1:A:411:PHE:HB2	1.88	0.55
1:A:1029:ASP:OD1	1:A:1030:LEU:N	2.40	0.55
1:A:144:THR:OG1	1:A:215:GLN:OE1	2.19	0.55
1:A:742:ASN:CG	1:A:743:LEU:H	2.13	0.55
1:A:1123:GLU:HB3	1:A:1128:SER:HA	1.89	0.55
1:A:1414:TYR:OH	1:A:1418:ARG:NH1	2.38	0.55
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:C	2.32	0.55
1:A:10:ILE:HG12	1:A:11:ASN:N	2.22	0.55
1:A:421:GLN:HA	1:A:421:GLN:HE21	1.72	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:659:THR:HG22	1:A:699:GLN:HG2	1.89	0.55
1:A:1516:LEU:HD22	1:A:1537:GLU:HB3	1.88	0.55
1:A:658:LYS:HE3	1:A:699:GLN:CD	2.14	0.55
1:A:1561:PHE:CD2	1:A:1567:PHE:HB3	2.39	0.55
1:A:1939:GLU:O	1:A:1943:LYS:CB	2.54	0.55
1:A:614:CYS:O	1:A:1203:HIS:NE2	2.39	0.55
1:A:1055:ALA:HB2	1:A:1062:VAL:HG21	1.89	0.55
1:A:1545:PHE:CD1	1:A:1545:PHE:N	2.73	0.55
1:A:84:PHE:HB3	1:A:88:SER:OG	2.07	0.54
1:A:98:VAL:HG23	1:A:108:GLY:O	2.07	0.54
1:A:1477:LEU:CD2	1:A:1590:LYS:NZ	2.69	0.54
1:A:2041:MET:SD	1:A:2041:MET:N	2.80	0.54
1:A:347:LYS:CD	1:A:348:THR:O	2.56	0.54
1:A:796:PRO:HG2	1:A:1161:PRO:HB2	1.89	0.54
1:A:1309:TYR:HE1	1:A:1324:ARG:HG2	1.73	0.54
1:A:18:LEU:HD13	1:A:146:ILE:CD1	2.34	0.54
1:A:971:ARG:HH21	1:A:971:ARG:CG	2.18	0.54
1:A:354:SER:O	1:A:357:ASP:N	2.40	0.54
1:A:727:VAL:HG13	1:A:727:VAL:O	2.07	0.54
1:A:1543:ALA:HA	1:A:1797:PRO:HB3	1.88	0.54
1:A:1567:PHE:CD1	1:A:1567:PHE:C	2.85	0.54
1:A:1569:ASN:HA	1:A:1572:ALA:CB	2.38	0.54
1:A:1521:TRP:HB2	1:A:1522:PHE:CE2	2.42	0.54
1:A:369:LEU:HD22	1:A:369:LEU:C	2.32	0.54
1:A:401:PRO:HB2	1:A:405:LYS:HE2	1.89	0.54
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:CE	2.38	0.54
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:CZ3	2.43	0.54
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:N	2.40	0.54
1:A:1519:GLU:C	1:A:1521:TRP:N	2.57	0.54
1:A:1654:PHE:C	1:A:1656:THR:H	2.15	0.54
1:A:365:TRP:CH2	1:A:554:ILE:HG13	2.43	0.54
1:A:1232:PHE:HB2	1:A:1597:ILE:HG12	1.90	0.53
1:A:510:LEU:O	1:A:516:GLN:NE2	2.41	0.53
1:A:917:GLY:C	1:A:920:ARG:CD	2.80	0.53
1:A:923:TYR:HE2	1:A:1080:GLN:H	1.56	0.53
1:A:193:TYR:CD1	1:A:193:TYR:C	2.86	0.53
1:A:1459:ASN:O	1:A:1460:GLN:C	2.51	0.53
1:A:1973:GLU:CB	1:A:1976:LEU:HD21	2.37	0.53
1:A:842:ILE:HG13	1:A:888:TRP:HE3	1.72	0.53
1:A:864:VAL:CG1	1:A:867:LYS:CD	2.86	0.53
1:A:1064:TRP:CD1	1:A:1064:TRP:C	2.86	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1385:LYS:O	1:A:1388:GLU:HG3	2.09	0.53
1:A:1744:SER:OG	1:A:1745:ASN:N	2.41	0.53
1:A:1970:GLU:CD	1:A:1970:GLU:N	2.63	0.53
1:A:1973:GLU:HG3	1:A:1976:LEU:HD23	1.90	0.53
1:A:656:LYS:O	1:A:659:THR:OG1	2.21	0.53
1:A:323:THR:O	1:A:454:LEU:CD2	2.57	0.53
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:CB	2.82	0.53
1:A:405:LYS:HB2	1:A:405:LYS:HZ3	1.74	0.53
1:A:1477:LEU:CD2	1:A:1590:LYS:HZ3	2.22	0.53
1:A:1838:THR:HA	1:A:1844:VAL:HA	1.91	0.53
1:A:1937:LEU:HD21	1:A:2028:LYS:HE3	1.81	0.53
1:A:23:LEU:HD12	1:A:177:VAL:O	2.08	0.53
1:A:671:MET:HE3	1:A:1180:GLU:CD	2.34	0.52
1:A:762:THR:HG23	1:A:762:THR:O	2.07	0.52
1:A:1137:LYS:CE	1:A:1137:LYS:HA	2.34	0.52
1:A:89:LYS:O	1:A:89:LYS:HG3	2.08	0.52
1:A:984:ASN:HB2	1:A:1128:SER:HB2	1.90	0.52
1:A:1066:ASP:OD1	1:A:1066:ASP:O	2.28	0.52
1:A:1313:ILE:HG12	1:A:1547:TRP:HB3	1.91	0.52
1:A:1457:ASN:O	1:A:1461:GLU:OE2	2.27	0.52
1:A:1556:LEU:HD11	1:A:1564:HIS:CG	2.20	0.52
1:A:1703:PHE:CE2	1:A:1706:PRO:HA	2.44	0.52
1:A:843:LEU:O	1:A:844:ASP:CB	2.54	0.52
1:A:1275:PHE:HE2	1:A:1277:LEU:CD2	2.22	0.52
1:A:12:VAL:CG2	1:A:13:GLU:N	2.72	0.52
1:A:1710:PHE:O	1:A:1718:GLY:N	2.39	0.52
1:A:669:THR:HG21	1:A:706:HIS:CE1	2.44	0.52
1:A:1067:LYS:HD2	1:A:1067:LYS:C	2.34	0.52
1:A:380:VAL:O	1:A:380:VAL:CG1	2.52	0.52
1:A:1593:GLY:C	1:A:1595:THR:HG22	2.35	0.52
1:A:831:GLU:OE2	1:A:831:GLU:N	2.39	0.52
1:A:1399:LEU:N	1:A:1399:LEU:CD1	2.73	0.52
1:A:1973:GLU:CG	1:A:1976:LEU:CD2	2.87	0.52
1:A:965:HIS:HB3	1:A:1989:TRP:HZ3	1.74	0.52
1:A:1357:LEU:O	1:A:1357:LEU:CG	2.58	0.52
1:A:1910:ILE:N	1:A:1910:ILE:CD1	2.73	0.52
1:A:235:GLU:N	1:A:236:PRO:HD3	2.25	0.51
1:A:371:ASP:CG	1:A:376:ASN:HD22	2.18	0.51
1:A:990:ASN:ND2	1:A:1080:GLN:OE1	2.43	0.51
1:A:1180:GLU:CG	1:A:1185:PHE:CD1	2.94	0.51
1:A:1687:SER:O	1:A:1688:ILE:HG13	2.09	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:842:ILE:N	1:A:842:ILE:CD1	2.73	0.51
1:A:678:PRO:HD3	1:A:1977:ASP:OD1	2.10	0.51
1:A:790:TRP:H	1:A:790:TRP:CD1	2.29	0.51
1:A:827:GLN:N	1:A:827:GLN:OE1	2.43	0.51
1:A:861:TYR:CZ	1:A:865:GLN:HG3	2.46	0.51
1:A:1299:THR:C	1:A:1300:THR:CG2	2.83	0.51
1:A:90:THR:HG23	1:A:90:THR:O	2.10	0.51
1:A:254:GLU:O	1:A:258:SER:OG	2.26	0.51
1:A:835:ARG:HG2	1:A:840:LYS:HZ1	1.73	0.51
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:HB3	1.76	0.51
1:A:1915:MET:SD	1:A:1915:MET:N	2.84	0.51
1:A:550:PRO:HG2	1:A:574:ASP:OD2	2.11	0.51
1:A:1556:LEU:C	1:A:1558:ASP:N	2.63	0.51
1:A:1654:PHE:O	1:A:1656:THR:O	2.29	0.51
1:A:1590:LYS:O	1:A:1592:GLY:N	2.44	0.51
1:A:121:THR:HG22	1:A:164:ARG:HD3	1.92	0.51
1:A:973:LEU:CD2	1:A:973:LEU:N	2.74	0.51
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:CB	2.41	0.50
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:HB3	2.41	0.50
1:A:1339:MET:HG3	1:A:1415:LEU:HB3	1.93	0.50
1:A:1561:PHE:HZ	1:A:1570:PHE:CB	2.20	0.50
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:SER:H	2.23	0.50
1:A:1299:THR:O	1:A:1300:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:595:LEU:N	1:A:595:LEU:CD2	2.74	0.50
1:A:1046:ASP:N	1:A:1047:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:235:GLU:N	1:A:236:PRO:CD	2.74	0.50
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CB	2.81	0.50
1:A:1906:LYS:HD3	1:A:1912:ASN:OD1	2.12	0.50
1:A:95:LEU:CA	1:A:96:SER:CB	2.75	0.50
1:A:720:LEU:HD11	1:A:1176:VAL:HG11	1.93	0.50
1:A:1290:ARG:NH2	1:A:1575:ASP:O	2.45	0.50
1:A:1954:VAL:HG22	1:A:1956:ILE:HD12	1.94	0.50
1:A:12:VAL:HG22	1:A:13:GLU:N	2.26	0.50
1:A:26:GLN:OE1	1:A:30:ARG:CD	2.57	0.50
1:A:84:PHE:C	1:A:87:LEU:CD1	2.85	0.50
1:A:95:LEU:HA	1:A:96:SER:HB3	1.86	0.50
1:A:734:HIS:NE2	1:A:741:THR:HG21	2.26	0.50
1:A:1701:GLY:H	1:A:1845:MET:HE1	1.76	0.50
1:A:733:PHE:HA	1:A:739:ARG:O	2.11	0.50
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CG	2.95	0.50
1:A:1195:THR:OG1	1:A:1228:GLY:O	2.27	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1811:ARG:O	1:A:1812:GLY:C	2.52	0.50
1:A:111:PRO:HG2	1:A:114:ILE:HD11	1.94	0.49
1:A:1254:LEU:HD11	1:A:1409:VAL:HG11	1.93	0.49
1:A:1833:LEU:HB2	1:A:1850:TYR:HB3	1.94	0.49
1:A:1568:ARG:N	1:A:1568:ARG:C	2.65	0.49
1:A:1652:GLU:OE1	1:A:1653:ALA:C	2.56	0.49
1:A:1283:PHE:O	1:A:1283:PHE:CD2	2.65	0.49
1:A:1519:GLU:HG2	1:A:1526:ARG:HB2	1.94	0.49
1:A:1798:ALA:C	1:A:1800:ARG:H	2.17	0.49
1:A:1976:LEU:HD23	1:A:1976:LEU:H	1.74	0.49
1:A:325:LEU:HD21	1:A:327:ARG:HE	1.77	0.49
1:A:365:TRP:CD2	1:A:595:LEU:HD11	2.46	0.49
1:A:790:TRP:CD1	1:A:790:TRP:N	2.80	0.49
1:A:1694:ARG:CZ	1:A:1816:ARG:HG2	2.42	0.49
1:A:155:ARG:CZ	1:A:155:ARG:CB	2.86	0.49
1:A:364:LEU:C	1:A:364:LEU:CD2	2.86	0.49
1:A:523:CYS:SG	1:A:1253:CYS:HB3	2.52	0.49
1:A:1428:HIS:ND1	1:A:1428:HIS:N	2.60	0.49
1:A:2028:LYS:CD	1:A:2032:ARG:NH2	2.75	0.49
1:A:239:GLU:CG	1:A:240:ARG:N	2.75	0.49
1:A:104:ASP:CG	1:A:104:ASP:O	2.30	0.49
1:A:1521:TRP:HE1	1:A:1538:TRP:HZ2	1.60	0.49
1:A:1529:LEU:CD2	1:A:1533:LEU:CB	2.86	0.49
1:A:292:THR:N	1:A:295:GLU:OE2	2.34	0.49
1:A:973:LEU:HG	1:A:974:GLY:O	2.12	0.49
1:A:1455:SER:CA	1:A:1458:PRO:HG3	2.41	0.49
1:A:1530:GLY:O	1:A:1534:LEU:CA	2.61	0.49
1:A:1908:GLN:NE2	1:A:2046:GLU:OE1	2.44	0.49
1:A:384:PRO:HG3	1:A:405:LYS:HZ1	0.32	0.48
1:A:1929:LYS:HB2	1:A:2012:LEU:HD23	1.95	0.48
1:A:226:ARG:NH2	1:A:839:THR:O	2.46	0.48
1:A:285:HIS:CE1	1:A:680:LEU:H	2.31	0.48
1:A:411:PHE:O	1:A:412:LYS:CE	2.61	0.48
1:A:921:GLU:OE2	1:A:923:TYR:CZ	2.65	0.48
1:A:1719:TYR:OH	1:A:1841:GLU:O	2.27	0.48
1:A:13:GLU:OE1	1:A:1853:ARG:NH2	2.47	0.48
1:A:26:GLN:CD	1:A:30:ARG:HB2	2.38	0.48
1:A:101:ILE:CG2	1:A:156:ARG:HB3	2.43	0.48
1:A:841:ASN:C	1:A:842:ILE:HD12	2.38	0.48
1:A:980:ILE:HD12	1:A:1174:ASN:OD1	2.14	0.48
1:A:1632:VAL:HG22	1:A:1883:TRP:NE1	2.29	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:246:PRO:HD2	1:A:1022:ARG:HB3	1.95	0.48
1:A:385:ALA:HA	1:A:388:LEU:H	1.78	0.48
1:A:949:HIS:ND1	1:A:949:HIS:N	2.60	0.48
1:A:1180:GLU:HG2	1:A:1185:PHE:CE1	2.49	0.48
1:A:1392:SER:HB2	1:A:1393:PRO:HD3	0.68	0.48
1:A:973:LEU:CD2	1:A:973:LEU:H	2.24	0.48
1:A:1135:ARG:HH11	1:A:1137:LYS:CE	2.22	0.48
1:A:1561:PHE:CG	1:A:1567:PHE:HB2	2.39	0.48
1:A:1899:VAL:HA	1:A:1902:ALA:HB3	1.95	0.48
1:A:1518:SER:O	1:A:1522:PHE:CA	2.61	0.48
1:A:318:ARG:O	1:A:318:ARG:HG3	2.12	0.48
1:A:1789:ARG:HB2	1:A:1796:LYS:HG3	1.95	0.48
1:A:161:GLU:O	1:A:163:PRO:HD3	2.13	0.48
1:A:349:ASP:O	1:A:349:ASP:OD1	2.31	0.48
1:A:405:LYS:C	1:A:405:LYS:HD3	2.38	0.48
1:A:1734:VAL:HG12	1:A:1752:LEU:HB3	1.96	0.48
1:A:466:ASN:HB3	1:A:468:LEU:HG	1.96	0.48
1:A:547:LYS:O	1:A:548:PHE:HB2	2.13	0.48
1:A:18:LEU:HD22	1:A:167:PHE:HB3	1.95	0.47
1:A:1567:PHE:C	1:A:1568:ARG:CA	2.75	0.47
1:A:1878:GLU:HG3	1:A:1879:PRO:HD2	1.95	0.47
1:A:89:LYS:HB2	1:A:89:LYS:HE3	1.60	0.47
1:A:364:LEU:HD23	1:A:364:LEU:O	2.14	0.47
1:A:887:MET:C	1:A:888:TRP:O	2.55	0.47
1:A:997:LYS:NZ	1:A:1090:LEU:HD21	2.29	0.47
1:A:1766:ARG:HA	1:A:1793:PHE:CZ	2.49	0.47
1:A:141:ALA:HA	1:A:144:THR:HG22	1.95	0.47
1:A:1512:LYS:NZ	1:A:1577:LYS:HE2	2.29	0.47
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1563:SER:C	2.38	0.47
1:A:474:TYR:OH	1:A:576:THR:OG1	2.29	0.47
1:A:734:HIS:CD2	1:A:741:THR:CG2	2.95	0.47
1:A:876:GLU:OE2	1:A:876:GLU:N	2.47	0.47
1:A:726:ARG:HD2	1:A:1189:ARG:HD3	1.89	0.47
1:A:1460:GLN:N	1:A:1460:GLN:CD	2.73	0.47
1:A:1474:VAL:HG23	1:A:1584:LEU:HG	1.97	0.47
1:A:1586:ALA:CB	1:A:1595:THR:CG2	2.87	0.47
1:A:1963:PHE:HE2	1:A:1965:ASP:HB3	1.80	0.47
1:A:408:TYR:HD1	1:A:408:TYR:O	1.98	0.47
1:A:657:SER:HA	1:A:916:HIS:CD2	2.48	0.47
1:A:21:PRO:HA	1:A:180:ASN:HB3	1.97	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:161:GLU:O	1:A:162:ASN:O	2.33	0.47
1:A:535:HIS:CG	1:A:535:HIS:O	2.67	0.47
1:A:594:GLU:C	1:A:595:LEU:HD22	2.40	0.47
1:A:665:LEU:HD12	1:A:690:LEU:HD21	1.96	0.47
1:A:982:SER:OG	1:A:983:SER:N	2.47	0.47
1:A:1648:GLU:H	1:A:1649:MET:HE1	1.79	0.47
1:A:554:ILE:O	1:A:566:TYR:HA	2.14	0.47
1:A:973:LEU:HD23	1:A:973:LEU:N	2.24	0.47
1:A:1135:ARG:NH1	1:A:1137:LYS:HE3	2.26	0.47
1:A:1308:TYR:CE2	1:A:1324:ARG:HB2	2.50	0.47
1:A:1956:ILE:HG23	1:A:1962:ASP:HA	1.97	0.47
1:A:540:GLU:HG3	1:A:556:LYS:HE2	1.97	0.47
1:A:102:THR:O	1:A:102:THR:OG1	2.11	0.47
1:A:365:TRP:CE2	1:A:595:LEU:HD11	2.32	0.47
1:A:1182:ASN:O	1:A:1184:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:1867:SER:HB3	1:A:1869:ARG:HG2	1.97	0.47
1:A:99:PHE:N	1:A:100:PRO:CD	2.78	0.46
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:N	2.48	0.46
1:A:850:ALA:HA	1:A:873:LYS:HA	1.98	0.46
1:A:1175:THR:HG21	1:A:1178:CYS:HB2	1.96	0.46
1:A:1299:THR:C	1:A:1300:THR:HG23	2.39	0.46
1:A:1550:THR:O	1:A:1552:PRO:HD3	2.14	0.46
1:A:1556:LEU:HD21	1:A:1564:HIS:CA	2.45	0.46
1:A:1699:THR:OG1	1:A:1767:ARG:NH1	2.48	0.46
1:A:408:TYR:CD1	1:A:408:TYR:N	2.83	0.46
1:A:668:TYR:CZ	1:A:1170:LYS:HD2	2.51	0.46
1:A:672:GLU:O	1:A:675:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:1589:LYS:HA	1:A:1589:LYS:HD3	1.55	0.46
1:A:1688:ILE:O	1:A:1692:ILE:HG13	2.15	0.46
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:CA	2.42	0.46
1:A:1625:SER:O	1:A:1629:LEU:HB2	2.15	0.46
1:A:1862:ALA:O	1:A:1866:TRP:N	2.44	0.46
1:A:421:GLN:NE2	1:A:421:GLN:CA	2.76	0.46
1:A:756:LYS:HB3	1:A:1204:GLN:NE2	2.23	0.46
1:A:951:THR:CG2	1:A:1181:TYR:OH	2.61	0.46
1:A:1255:HIS:O	1:A:1257:LEU:N	2.42	0.46
1:A:1280:ASN:OD1	1:A:1281:PRO:HD2	2.15	0.46
1:A:1458:PRO:CG	1:A:1458:PRO:O	2.52	0.46
1:A:1519:GLU:OE2	1:A:1526:ARG:CB	2.64	0.46
1:A:1829:ARG:O	1:A:1830:GLY:C	2.58	0.46
1:A:1934:ARG:HG2	1:A:1936:LYS:NZ	2.30	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:18:LEU:O	1:A:180:ASN:ND2	2.49	0.46
1:A:973:LEU:O	1:A:974:GLY:O	2.33	0.46
1:A:1559:GLY:HA3	1:A:1560:PRO:HD3	1.23	0.46
1:A:1:MET:O	1:A:2:ASN:CB	2.64	0.46
1:A:229:SER:O	1:A:233:LEU:HG	2.16	0.46
1:A:81:ASP:C	1:A:85:SER:OG	2.51	0.46
1:A:1181:TYR:CD1	1:A:1182:ASN:N	2.83	0.46
1:A:1619:ASN:OD1	1:A:1620:GLN:N	2.48	0.46
1:A:1945:VAL:O	1:A:1946:VAL:C	2.58	0.46
1:A:239:GLU:CD	1:A:239:GLU:N	2.73	0.46
1:A:117:ARG:NH2	1:A:119:ASP:OD2	2.46	0.46
1:A:180:ASN:N	1:A:180:ASN:OD1	2.49	0.46
1:A:364:LEU:HA	1:A:415:LEU:HD21	1.97	0.46
1:A:1435:LYS:HE2	1:A:1437:SER:HB3	1.97	0.46
1:A:1789:ARG:O	1:A:1796:LYS:CG	2.62	0.46
1:A:206:ARG:HD3	1:A:207:SER:H	1.80	0.45
1:A:913:LYS:HD3	1:A:915:GLN:OE1	2.16	0.45
1:A:1233:SER:HB2	1:A:1597:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:1548:LEU:CD2	1:A:1555:THR:HG22	2.45	0.45
1:A:1634:PHE:HD2	1:A:1638:ASN:HB3	1.81	0.45
1:A:1791:SER:H	1:A:1796:LYS:HE3	1.79	0.45
1:A:365:TRP:CE3	1:A:554:ILE:HD11	2.52	0.45
1:A:411:PHE:C	1:A:412:LYS:HG2	2.41	0.45
1:A:840:LYS:HA	1:A:842:ILE:HD11	1.99	0.45
1:A:1305:LYS:HE2	1:A:1305:LYS:HB3	1.63	0.45
1:A:1545:PHE:O	1:A:1548:LEU:HB2	2.16	0.45
1:A:1567:PHE:HE1	1:A:1571:ILE:HB	1.42	0.45
1:A:347:LYS:HG2	1:A:348:THR:H	1.81	0.45
1:A:572:LYS:HB3	1:A:592:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:1137:LYS:NZ	1:A:1137:LYS:CB	2.73	0.45
1:A:1426:SER:O	1:A:1426:SER:OG	2.27	0.45
1:A:1535:LYS:HA	1:A:1535:LYS:HD2	1.66	0.45
1:A:1748:GLU:O	1:A:1749:GLU:CD	2.59	0.45
1:A:1827:ARG:HB2	1:A:1834:ASN:HB2	1.97	0.45
1:A:96:SER:OG	1:A:99:PHE:HE1	1.96	0.45
1:A:815:ARG:HD2	1:A:1958:GLU:HG2	1.98	0.45
1:A:1270:ASP:O	1:A:1275:PHE:HB3	2.16	0.45
1:A:1345:ARG:O	1:A:1349:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:1878:GLU:CG	1:A:1879:PRO:HD2	2.47	0.45
1:A:218:GLU:HG2	1:A:219:GLU:HG2	1.99	0.45
1:A:1593:GLY:O	1:A:1596:THR:HG22	2.16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:102:THR:O	1:A:103:HIS:HB2	2.16	0.45
1:A:726:ARG:CD	1:A:1189:ARG:HD3	2.47	0.45
1:A:1275:PHE:CE2	1:A:1277:LEU:CD2	2.98	0.45
1:A:181:MET:HB3	1:A:183:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:324:SER:O	1:A:324:SER:OG	2.24	0.45
1:A:405:LYS:NZ	1:A:405:LYS:O	2.43	0.45
1:A:612:LEU:H	1:A:613:PRO:CD	2.29	0.45
1:A:723:ARG:O	1:A:724:GLU:CG	2.65	0.45
1:A:1028:VAL:HG21	1:A:1033:LEU:HD21	1.98	0.45
1:A:1182:ASN:O	1:A:1184:GLU:N	2.50	0.45
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:CG1	2.93	0.45
1:A:193:TYR:HE2	1:A:1946:VAL:HG11	1.79	0.45
1:A:545:LYS:HD2	1:A:546:LEU:O	2.17	0.45
1:A:1726:THR:OG1	1:A:1816:ARG:NH1	2.39	0.45
1:A:1046:ASP:OD1	1:A:1046:ASP:O	2.35	0.45
1:A:411:PHE:N	1:A:411:PHE:HD1	2.14	0.44
1:A:486:LEU:HD13	1:A:1247:TYR:CD2	2.52	0.44
1:A:691:ASP:OD1	1:A:692:GLY:N	2.45	0.44
1:A:1519:GLU:HA	1:A:1522:PHE:H	1.82	0.44
1:A:263:VAL:HG21	1:A:1961:ILE:HD13	1.99	0.44
1:A:1646:LYS:CE	1:A:1650:ILE:CD1	2.84	0.44
1:A:29:ASP:C	1:A:31:PRO:HD3	2.40	0.44
1:A:384:PRO:CD	1:A:405:LYS:HE3	2.45	0.44
1:A:971:ARG:HB2	1:A:971:ARG:NH2	2.12	0.44
1:A:1455:SER:HA	1:A:1458:PRO:CG	2.44	0.44
1:A:1542:ARG:NH2	1:A:1550:THR:H	2.05	0.44
1:A:1622:ARG:HD3	1:A:1650:ILE:HB	2.00	0.44
1:A:1790:LEU:HB3	1:A:1794:LYS:O	2.17	0.44
1:A:1874:PHE:O	1:A:1881:CYS:HB2	2.17	0.44
1:A:11:ASN:OD1	1:A:12:VAL:N	2.49	0.44
1:A:1520:VAL:HG21	1:A:1538:TRP:CD1	2.52	0.44
1:A:1672:MET:SD	1:A:1696:GLN:HB3	2.57	0.44
1:A:734:HIS:CB	1:A:737:SER:O	2.65	0.44
1:A:16:LEU:C	1:A:16:LEU:HD23	2.42	0.44
1:A:916:HIS:C	1:A:920:ARG:HD3	2.41	0.44
1:A:1190:HIS:O	1:A:1190:HIS:CD2	2.71	0.44
1:A:1333:THR:OG1	1:A:1334:LEU:N	2.51	0.44
1:A:221:LEU:HD23	1:A:221:LEU:HA	1.87	0.44
1:A:256:PHE:CE1	1:A:807:ARG:HB2	2.53	0.44
1:A:888:TRP:CD1	1:A:888:TRP:H	2.33	0.44
1:A:1290:ARG:NH1	1:A:1575:ASP:O	2.50	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:265:PHE:HE1	1:A:794:ASP:HB2	1.82	0.44
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:HB2	2.18	0.44
1:A:1559:GLY:C	1:A:1561:PHE:H	2.26	0.44
1:A:837:ILE:HG23	1:A:838:GLY:H	1.82	0.44
1:A:1062:VAL:C	1:A:1064:TRP:H	2.25	0.44
1:A:1270:ASP:OD2	1:A:1305:LYS:NZ	2.49	0.44
1:A:1632:VAL:HG22	1:A:1883:TRP:CD1	2.53	0.44
1:A:187:GLU:HA	1:A:190:GLU:HB2	1.98	0.43
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:HB2	1.99	0.43
1:A:384:PRO:CD	1:A:405:LYS:CE	2.96	0.43
1:A:672:GLU:OE1	1:A:685:LYS:NZ	2.43	0.43
1:A:1561:PHE:CE2	1:A:1567:PHE:CD1	3.00	0.43
1:A:4:GLU:CA	1:A:7:CYS:SG	3.04	0.43
1:A:606:LEU:HD23	1:A:606:LEU:HA	1.85	0.43
1:A:887:MET:HB3	1:A:888:TRP:CD1	2.54	0.43
1:A:917:GLY:HA2	1:A:920:ARG:CG	2.41	0.43
1:A:1459:ASN:CG	1:A:1460:GLN:OE1	2.61	0.43
1:A:1618:ASP:OD1	1:A:1618:ASP:N	2.50	0.43
1:A:385:ALA:HB1	1:A:390:ILE:HG13	1.99	0.43
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:HA3	1.83	0.43
1:A:1275:PHE:CE2	1:A:1277:LEU:HD21	2.48	0.43
1:A:1769:CYS:O	1:A:1773:GLY:N	2.51	0.43
1:A:95:LEU:HA	1:A:95:LEU:HD12	1.76	0.43
1:A:1633:LEU:O	1:A:1634:PHE:CD1	2.71	0.43
1:A:881:LEU:HB3	1:A:886:VAL:HG21	2.01	0.43
1:A:974:GLY:HA2	1:A:975:PRO:HD3	1.42	0.43
1:A:1694:ARG:HH22	1:A:1816:ARG:HB3	1.82	0.43
1:A:1712:ARG:HH12	1:A:1720:LYS:HE2	1.82	0.43
1:A:799:HIS:NE2	1:A:1076:THR:HB	2.34	0.43
1:A:1579:ARG:CG	1:A:1580:SER:N	2.75	0.43
1:A:1879:PRO:O	1:A:1883:TRP:N	2.51	0.43
1:A:359:GLY:HA2	1:A:363:GLU:HB3	1.99	0.43
1:A:511:SER:HA	1:A:516:GLN:HE21	1.84	0.43
1:A:707:LEU:HD23	1:A:707:LEU:HA	1.85	0.43
1:A:971:ARG:CG	1:A:971:ARG:NH2	2.76	0.43
1:A:1540:LYS:HA	1:A:1540:LYS:HD3	1.76	0.43
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1541:LEU:O	2.19	0.43
1:A:683:PRO:HB2	1:A:710:MET:HB2	2.01	0.43
1:A:1562:LEU:HD23	1:A:1562:LEU:C	2.44	0.43
1:A:335:TRP:HZ2	1:A:594:GLU:HB3	1.84	0.43
1:A:422:GLU:O	1:A:425:LEU:HG	2.18	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:805:PHE:CE2	1:A:1162:LEU:HD13	2.53	0.43
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:CA	2.32	0.43
1:A:1548:LEU:HD22	1:A:1549:SER:H	1.84	0.43
1:A:94:ARG:NH2	1:A:97:GLU:CD	2.76	0.43
1:A:384:PRO:HG2	1:A:405:LYS:CE	2.41	0.43
1:A:1886:LEU:HD23	1:A:1886:LEU:H	1.83	0.43
1:A:654:GLU:N	1:A:654:GLU:OE1	2.52	0.42
1:A:514:VAL:HG11	1:A:616:MET:HE2	2.00	0.42
1:A:611:ASN:OD1	1:A:611:ASN:C	2.61	0.42
1:A:762:THR:O	1:A:762:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:1477:LEU:HD21	1:A:1590:LYS:HZ3	1.76	0.42
1:A:1551:ASP:HA	1:A:1552:PRO:HD2	0.96	0.42
1:A:1642:THR:O	1:A:1646:LYS:HB2	2.19	0.42
1:A:1868:ASN:C	1:A:1870:ASP:N	2.62	0.42
1:A:23:LEU:HD13	1:A:178:LEU:CB	2.45	0.42
1:A:297:LEU:HD12	1:A:680:LEU:HD22	2.01	0.42
1:A:1131:MET:HE3	1:A:1131:MET:HB2	1.94	0.42
1:A:1186:HIS:CE1	1:A:1191:LEU:HD11	2.53	0.42
1:A:1299:THR:O	1:A:1300:THR:CG2	2.67	0.42
1:A:1545:PHE:C	1:A:1546:ALA:O	2.39	0.42
1:A:1703:PHE:CD1	1:A:1725:TRP:HD1	2.37	0.42
1:A:1529:LEU:HD22	1:A:1533:LEU:HB2	1.98	0.42
1:A:1750:ILE:HD12	1:A:1790:LEU:HD21	2.02	0.42
1:A:3:LEU:O	1:A:4:GLU:C	2.62	0.42
1:A:145:LYS:HD2	1:A:145:LYS:HA	1.78	0.42
1:A:239:GLU:CD	1:A:240:ARG:N	2.64	0.42
1:A:378:GLU:OE1	1:A:411:PHE:CB	2.68	0.42
1:A:1002:LEU:HD23	1:A:1002:LEU:HA	1.81	0.42
1:A:1004:TRP:HD1	1:A:1005:PHE:CE1	2.36	0.42
1:A:1672:MET:SD	1:A:1696:GLN:HG2	2.60	0.42
1:A:933:GLN:NE2	1:A:1082:ILE:O	2.52	0.42
1:A:1110:TYR:HE2	1:A:1144:ARG:HG2	1.84	0.42
1:A:1263:GLY:O	1:A:1266:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:1441:LEU:HD12	1:A:1441:LEU:HA	1.96	0.42
1:A:1886:LEU:O	1:A:1886:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:181:MET:O	1:A:183:LEU:CD2	2.68	0.42
1:A:356:MET:HE2	1:A:356:MET:HB2	1.64	0.42
1:A:799:HIS:CE1	1:A:1076:THR:HB	2.55	0.42
1:A:997:LYS:HZ2	1:A:1164:GLY:H	1.68	0.42
1:A:1269:PRO:HB2	1:A:1275:PHE:CE2	2.53	0.42
1:A:1460:GLN:NE2	1:A:1460:GLN:C	2.70	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1534:LEU:C	1:A:1534:LEU:CD1	2.85	0.42
1:A:1937:LEU:CD1	1:A:2028:LYS:HZ1	2.33	0.42
1:A:1455:SER:CA	1:A:1458:PRO:CG	2.98	0.42
1:A:1460:GLN:NE2	1:A:1460:GLN:N	2.68	0.42
1:A:1632:VAL:HG12	1:A:1633:LEU:N	2.35	0.42
1:A:1797:PRO:O	1:A:1798:ALA:C	2.52	0.42
1:A:1823:GLU:O	1:A:1837:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:523:CYS:SG	1:A:546:LEU:HB3	2.60	0.42
1:A:811:SER:O	1:A:811:SER:OG	2.37	0.42
1:A:888:TRP:O	1:A:890:ILE:N	2.50	0.42
1:A:1066:ASP:OD1	1:A:1066:ASP:C	2.61	0.42
1:A:1528:LYS:CD	1:A:1528:LYS:N	2.76	0.42
1:A:1912:ASN:ND2	1:A:1919:PHE:CE1	2.82	0.42
1:A:468:LEU:HD22	1:A:514:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:1024:LYS:HB3	1:A:1024:LYS:HE3	1.65	0.41
1:A:1046:ASP:C	1:A:1048:PHE:N	2.78	0.41
1:A:1290:ARG:NH2	1:A:1576:ALA:HB3	2.34	0.41
1:A:1545:PHE:O	1:A:1548:LEU:CB	2.68	0.41
1:A:1589:LYS:O	1:A:1592:GLY:HA3	2.20	0.41
1:A:178:LEU:HD12	1:A:179:SER:N	2.34	0.41
1:A:1524:LEU:HD12	1:A:1526:ARG:CZ	2.50	0.41
1:A:1561:PHE:CZ	1:A:1567:PHE:CD1	3.08	0.41
1:A:1816:ARG:HD3	1:A:1816:ARG:HA	1.89	0.41
1:A:1910:ILE:HG23	1:A:1919:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:87:LEU:CD1	1:A:88:SER:N	2.81	0.41
1:A:997:LYS:HZ3	1:A:1090:LEU:HD21	1.86	0.41
1:A:1055:ALA:CB	1:A:1062:VAL:HG21	2.50	0.41
1:A:86:GLY:O	1:A:89:LYS:CG	2.48	0.41
1:A:250:ILE:O	1:A:250:ILE:HG22	2.21	0.41
1:A:1302:LEU:HD12	1:A:1304:ARG:H	1.85	0.41
1:A:1542:ARG:HD3	1:A:1548:LEU:O	2.21	0.41
1:A:1791:SER:HB3	1:A:1796:LYS:NZ	2.34	0.41
1:A:206:ARG:HD3	1:A:207:SER:N	2.35	0.41
1:A:1067:LYS:CD	1:A:1068:GLY:N	2.81	0.41
1:A:1400:SER:CB	1:A:1407:ARG:CZ	2.97	0.41
1:A:28:TYR:HB2	1:A:189:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:99:PHE:N	1:A:100:PRO:HD3	2.29	0.41
1:A:109:MET:HE3	1:A:109:MET:HB3	1.83	0.41
1:A:470:ALA:O	1:A:513:ASN:HB2	2.21	0.41
1:A:78:ILE:HD12	1:A:78:ILE:H	1.86	0.41
1:A:687:LEU:C	1:A:689:LYS:H	2.29	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1929:LYS:HD2	1:A:2009:TYR:HD1	1.86	0.41
1:A:253:LEU:O	1:A:257:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:854:PHE:HD1	1:A:907:ARG:HB3	1.86	0.41
1:A:1136:PRO:CG	1:A:1982:PHE:HB2	2.42	0.41
1:A:1329:THR:OG1	1:A:1569:ASN:O	2.28	0.41
1:A:1522:PHE:C	1:A:1524:LEU:N	2.76	0.41
1:A:1574:VAL:O	1:A:1575:ASP:O	2.38	0.41
1:A:1965:ASP:OD1	1:A:1965:ASP:N	2.52	0.41
1:A:495:ASP:OD1	1:A:500:HIS:NE2	2.54	0.41
1:A:510:LEU:HA	1:A:515:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:696:THR:H	1:A:699:GLN:NE2	2.19	0.41
1:A:718:PHE:CE1	1:A:732:THR:HA	2.56	0.41
1:A:756:LYS:HA	1:A:915:GLN:HG2	2.03	0.41
1:A:852:SER:HB3	1:A:924:VAL:HG21	2.03	0.41
1:A:912:LYS:NZ	1:A:920:ARG:NH2	2.68	0.41
1:A:926:ASP:OD1	1:A:926:ASP:C	2.64	0.41
1:A:1190:HIS:CD2	1:A:1190:HIS:C	2.96	0.41
1:A:1531:PRO:HA	1:A:1534:LEU:HD12	2.01	0.41
1:A:1559:GLY:C	1:A:1561:PHE:N	2.79	0.41
1:A:1626:ILE:O	1:A:1630:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:1731:ASP:OD1	1:A:1731:ASP:C	2.64	0.41
1:A:1988:LEU:O	1:A:1989:TRP:C	2.63	0.41
1:A:146:ILE:O	1:A:150:ARG:HB2	2.20	0.41
1:A:612:LEU:N	1:A:613:PRO:CD	2.84	0.41
1:A:863:GLU:OE1	1:A:864:VAL:CG2	2.46	0.41
1:A:1529:LEU:CB	1:A:1534:LEU:CA	2.97	0.41
1:A:1532:ARG:O	1:A:1536:GLU:HB3	2.16	0.41
1:A:369:LEU:C	1:A:369:LEU:CD2	2.94	0.40
1:A:694:LEU:HD21	1:A:700:VAL:HG22	2.03	0.40
1:A:835:ARG:HG2	1:A:840:LYS:NZ	2.36	0.40
1:A:1541:LEU:HD13	1:A:1541:LEU:HA	1.82	0.40
1:A:547:LYS:HE2	1:A:1253:CYS:HA	2.04	0.40
1:A:1071:TYR:HD1	1:A:1071:TYR:O	2.04	0.40
1:A:1729:MET:HE3	1:A:1729:MET:HB2	1.89	0.40
1:A:2030:GLY:O	1:A:2034:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:106:SER:HB3	1:A:156:ARG:HH22	1.85	0.40
1:A:864:VAL:O	1:A:864:VAL:HG12	2.20	0.40
1:A:1062:VAL:C	1:A:1064:TRP:N	2.80	0.40
1:A:724:GLU:HA	1:A:1985:ALA:HB3	2.04	0.40
1:A:1188:HIS:ND1	1:A:1989:TRP:HD1	2.19	0.40
1:A:1302:LEU:HG	1:A:1303:GLY:H	1.85	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1556:LEU:CD2	1:A:1564:HIS:CG	3.02	0.40
1:A:1584:LEU:HB3	1:A:1585:GLY:H	1.36	0.40
1:A:347:LYS:CG	1:A:348:THR:N	2.85	0.40
1:A:371:ASP:O	1:A:376:ASN:HB3	2.20	0.40
1:A:476:ASP:OD1	1:A:476:ASP:N	2.55	0.40
1:A:663:ILE:HD11	1:A:702:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:1210:ALA:HB3	1:A:1213:SER:HB3	2.03	0.40
1:A:1219:SER:O	1:A:1223:THR:HG23	2.22	0.40
1:A:1594:VAL:N	1:A:1595:THR:HG22	2.36	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	1832/2109 (87%)	1586 (87%)	209 (11%)	37 (2%)	6 25

All (37) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	163	PRO
1	A	356	MET
1	A	978	ILE
1	A	1424	SER
1	A	1426	SER
1	A	1433	THR
1	A	1560	PRO
1	A	1568	ARG
1	A	1575	ASP
1	A	1591	SER
1	A	1799	SER
1	A	2	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	15	GLY
1	A	95	LEU
1	A	411	PHE
1	A	1576	ALA
1	A	1578	SER
1	A	1590	LYS
1	A	352	PHE
1	A	888	TRP
1	A	974	GLY
1	A	1869	ARG
1	A	1402	GLY
1	A	1403	HIS
1	A	1588	VAL
1	A	31	PRO
1	A	103	HIS
1	A	337	PRO
1	A	977	SER
1	A	1581	VAL
1	A	722	PRO
1	A	1007	PRO
1	A	413	PRO
1	A	677	PRO
1	A	1797	PRO
1	A	1392	SER
1	A	1404	VAL

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	1635/1848 (88%)	1527 (93%)	108 (7%)	15	41

All (108) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	7	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	13	GLU
1	A	14	ASN
1	A	18	LEU
1	A	25	ASP
1	A	27	ILE
1	A	30	ARG
1	A	87	LEU
1	A	89	LYS
1	A	101	ILE
1	A	109	MET
1	A	155	ARG
1	A	161	GLU
1	A	181	MET
1	A	183	LEU
1	A	189	GLU
1	A	212	ILE
1	A	239	GLU
1	A	298	GLU
1	A	318	ARG
1	A	336	LEU
1	A	348	THR
1	A	349	ASP
1	A	356	MET
1	A	363	GLU
1	A	364	LEU
1	A	367	LYS
1	A	369	LEU
1	A	382	SER
1	A	387	GLU
1	A	388	LEU
1	A	405	LYS
1	A	407	THR
1	A	408	TYR
1	A	411	PHE
1	A	421	GLN
1	A	543	ILE
1	A	595	LEU
1	A	699	GLN
1	A	842	ILE
1	A	888	TRP
1	A	913	LYS
1	A	915	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	920	ARG
1	A	921	GLU
1	A	949	HIS
1	A	971	ARG
1	A	972	SER
1	A	973	LEU
1	A	1024	LYS
1	A	1060	ARG
1	A	1061	GLU
1	A	1062	VAL
1	A	1064	TRP
1	A	1067	LYS
1	A	1071	TYR
1	A	1107	LYS
1	A	1134	ILE
1	A	1135	ARG
1	A	1137	LYS
1	A	1140	MET
1	A	1180	GLU
1	A	1190	HIS
1	A	1191	LEU
1	A	1207	GLU
1	A	1399	LEU
1	A	1427	ILE
1	A	1428	HIS
1	A	1433	THR
1	A	1460	GLN
1	A	1477	LEU
1	A	1514	GLU
1	A	1521	TRP
1	A	1526	ARG
1	A	1527	THR
1	A	1528	LYS
1	A	1529	LEU
1	A	1534	LEU
1	A	1535	LYS
1	A	1537	GLU
1	A	1538	TRP
1	A	1539	ASP
1	A	1540	LYS
1	A	1541	LEU
1	A	1542	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1544	SER
1	A	1545	PHE
1	A	1548	LEU
1	A	1565	VAL
1	A	1566	GLN
1	A	1584	LEU
1	A	1588	VAL
1	A	1589	LYS
1	A	1590	LYS
1	A	1595	THR
1	A	1649	MET
1	A	1650	ILE
1	A	1652	GLU
1	A	1657	LEU
1	A	1694	ARG
1	A	1790	LEU
1	A	1791	SER
1	A	1795	ILE
1	A	1796	LYS
1	A	1810	GLU
1	A	1910	ILE
1	A	1911	ASP
1	A	1976	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (15) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	185	GLN
1	A	237	ASN
1	A	247	ASN
1	A	376	ASN
1	A	421	GLN
1	A	516	GLN
1	A	611	ASN
1	A	618	ASN
1	A	895	GLN
1	A	954	ASN
1	A	1057	HIS
1	A	1204	GLN
1	A	1403	HIS
1	A	1457	ASN
1	A	1564	HIS

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](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

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.

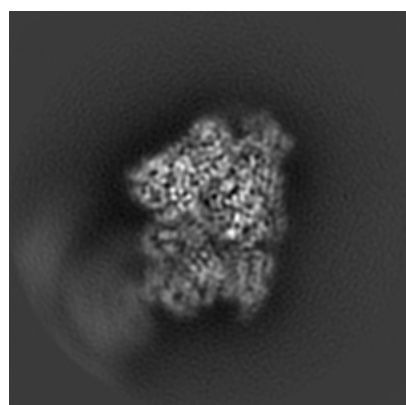
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-0828. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

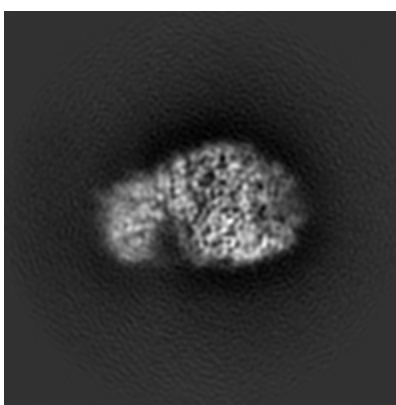
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

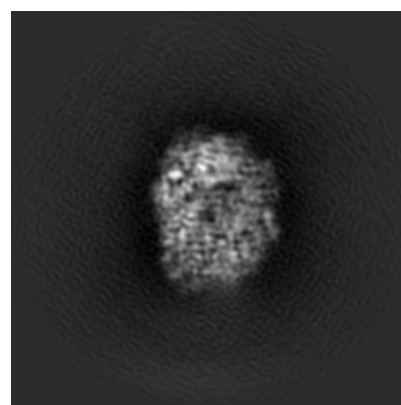
6.1.1 Primary map



X



Y

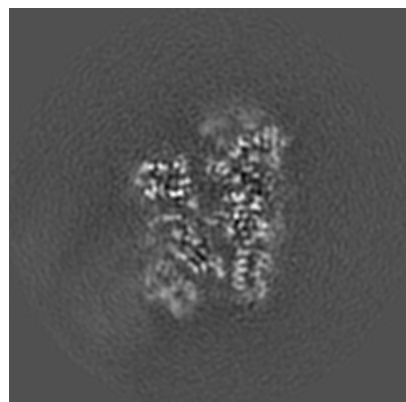


Z

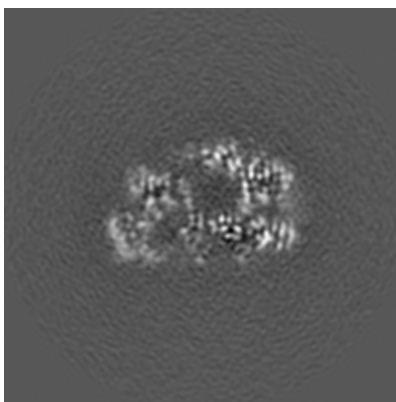
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

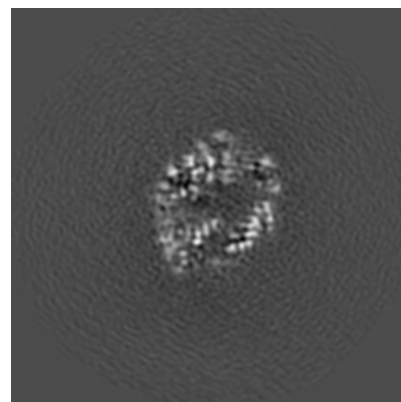
6.2.1 Primary map



X Index: 110



Y Index: 110

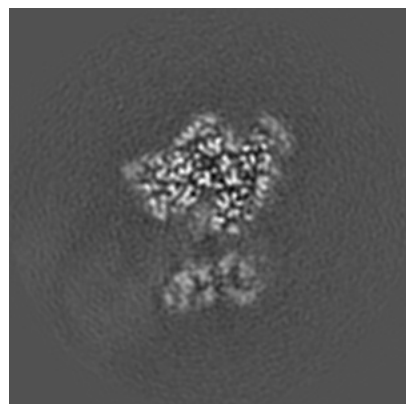


Z Index: 110

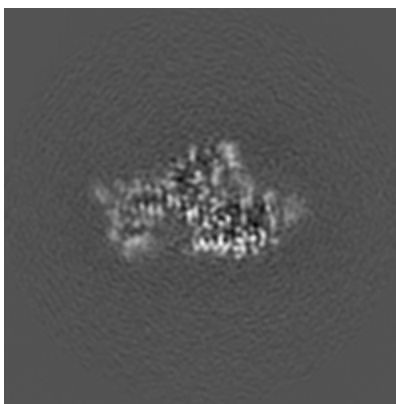
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

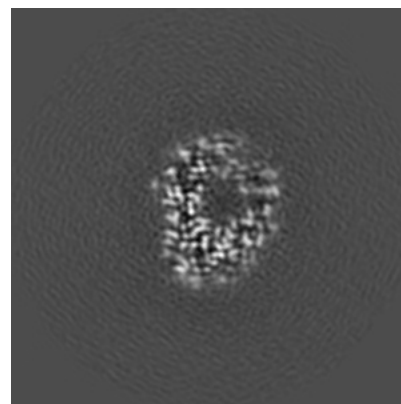
6.3.1 Primary map



X Index: 94



Y Index: 129

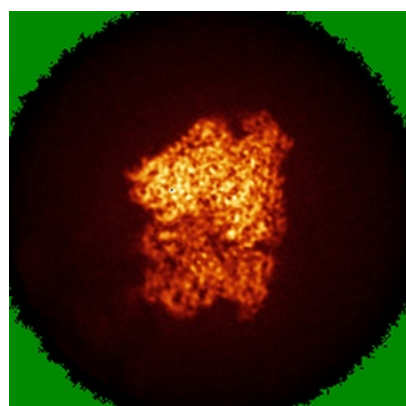


Z Index: 121

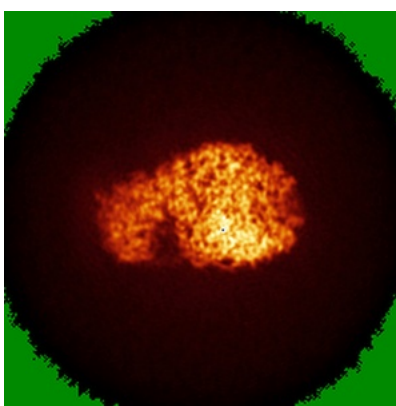
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

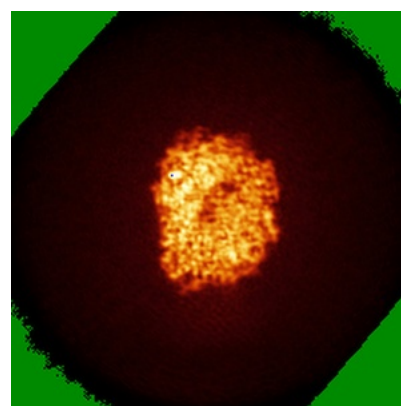
6.4.1 Primary map



X



Y

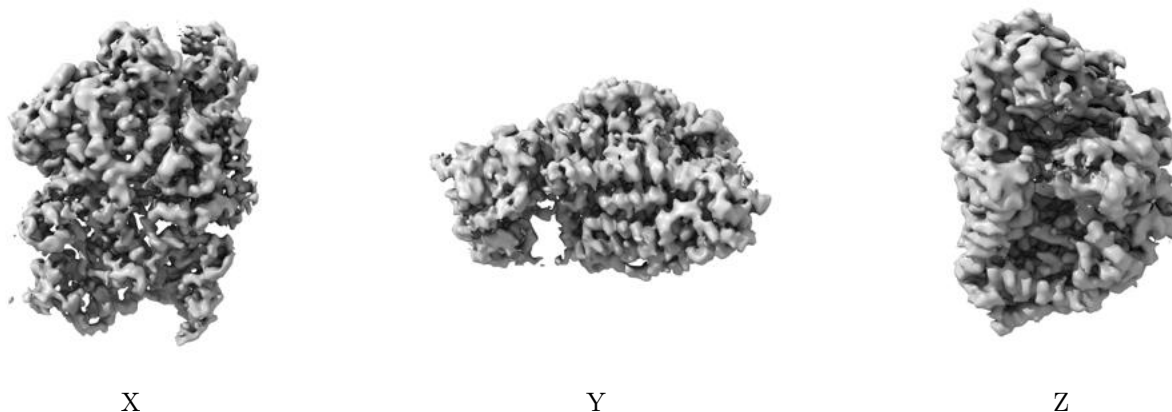


Z

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 0.0085. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

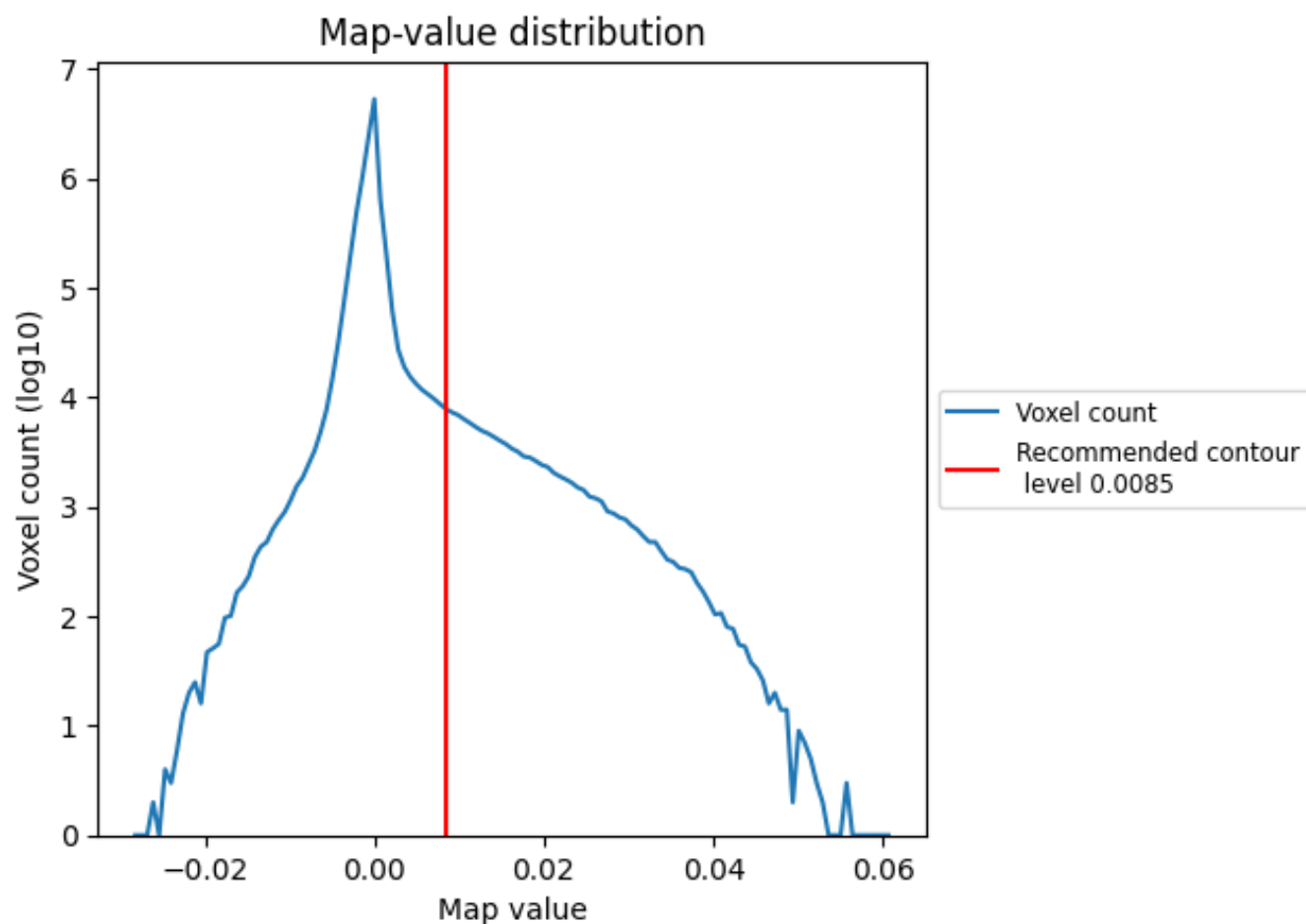
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

7 Map analysis [i](#)

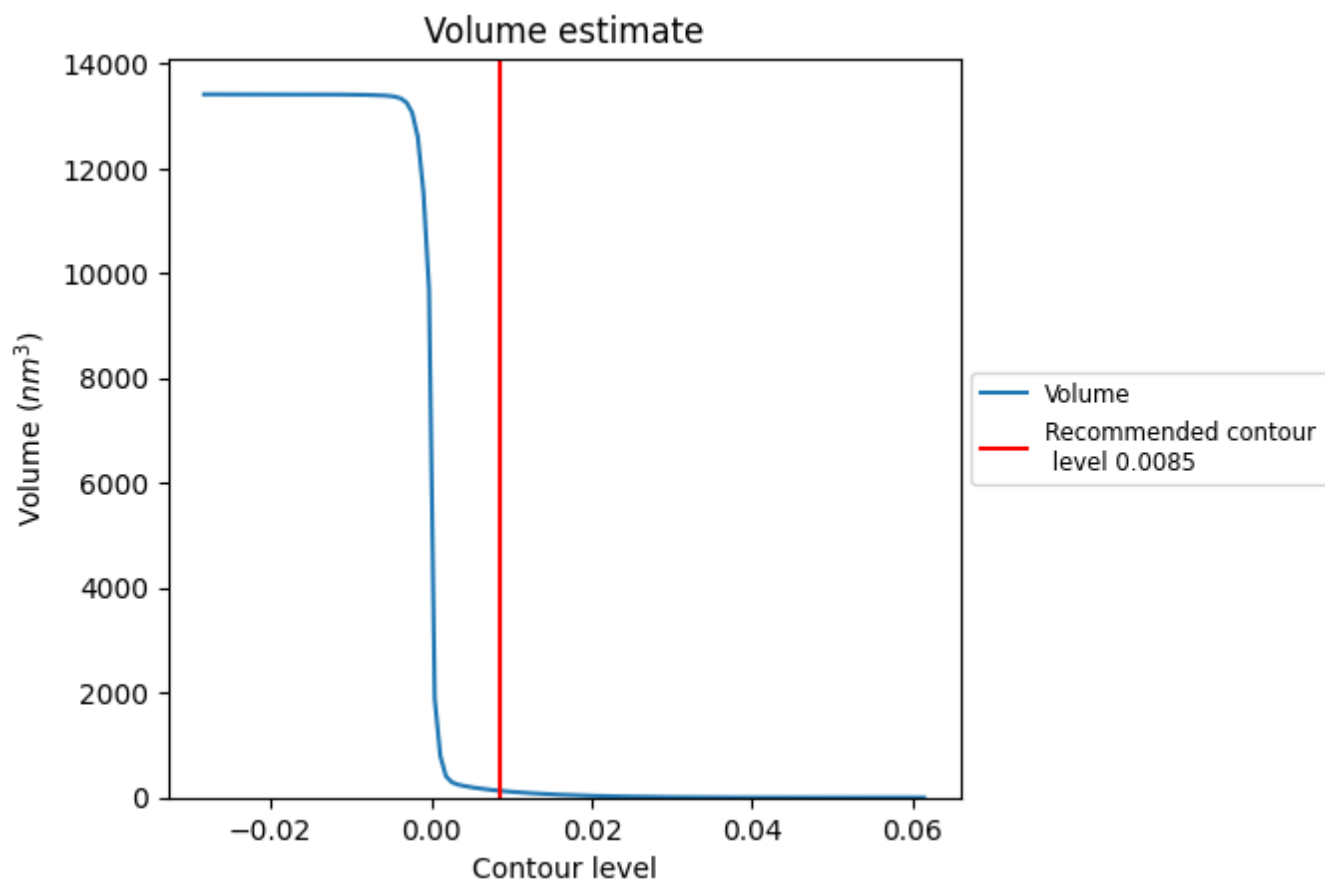
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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.

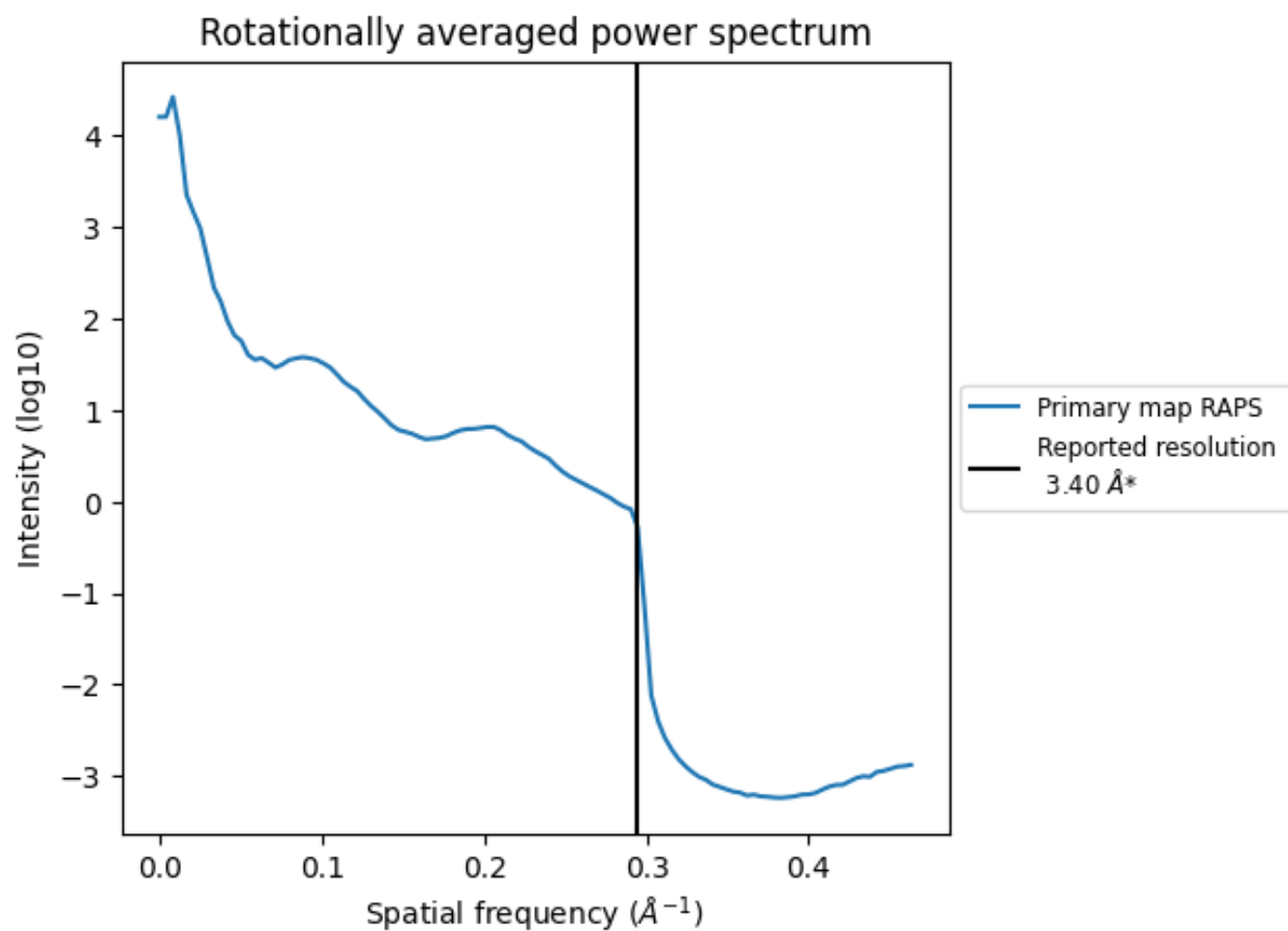
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 130 nm³; this corresponds to an approximate mass of 118 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 0.294 Å⁻¹

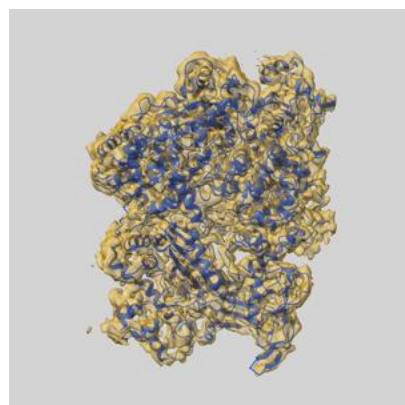
8 Fourier-Shell correlation ⓘ

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

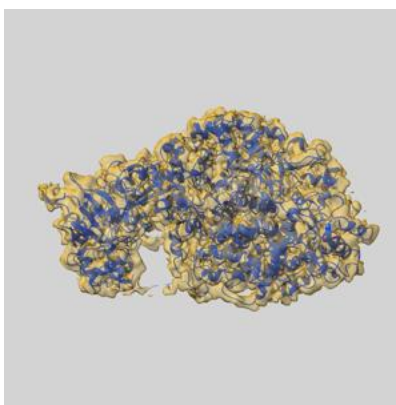
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-0828 and PDB model 6L42. Per-residue inclusion information can be found in section 3 on page 5.

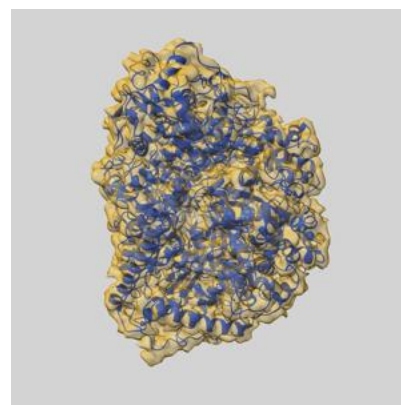
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



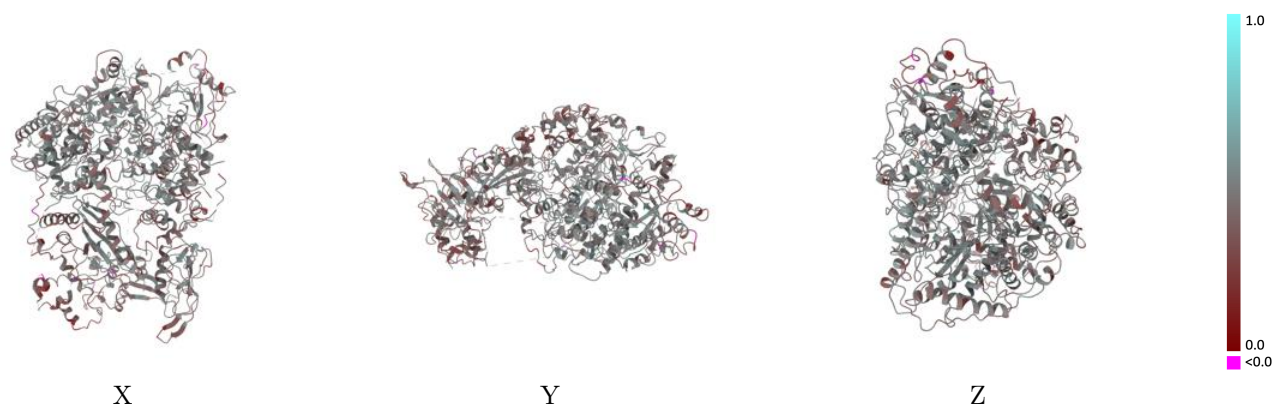
Y



Z

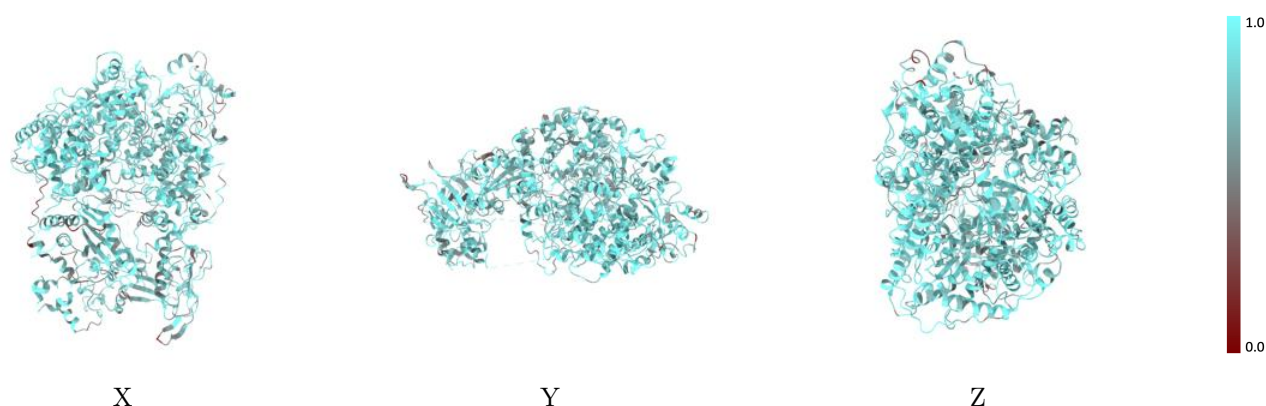
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.0085 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



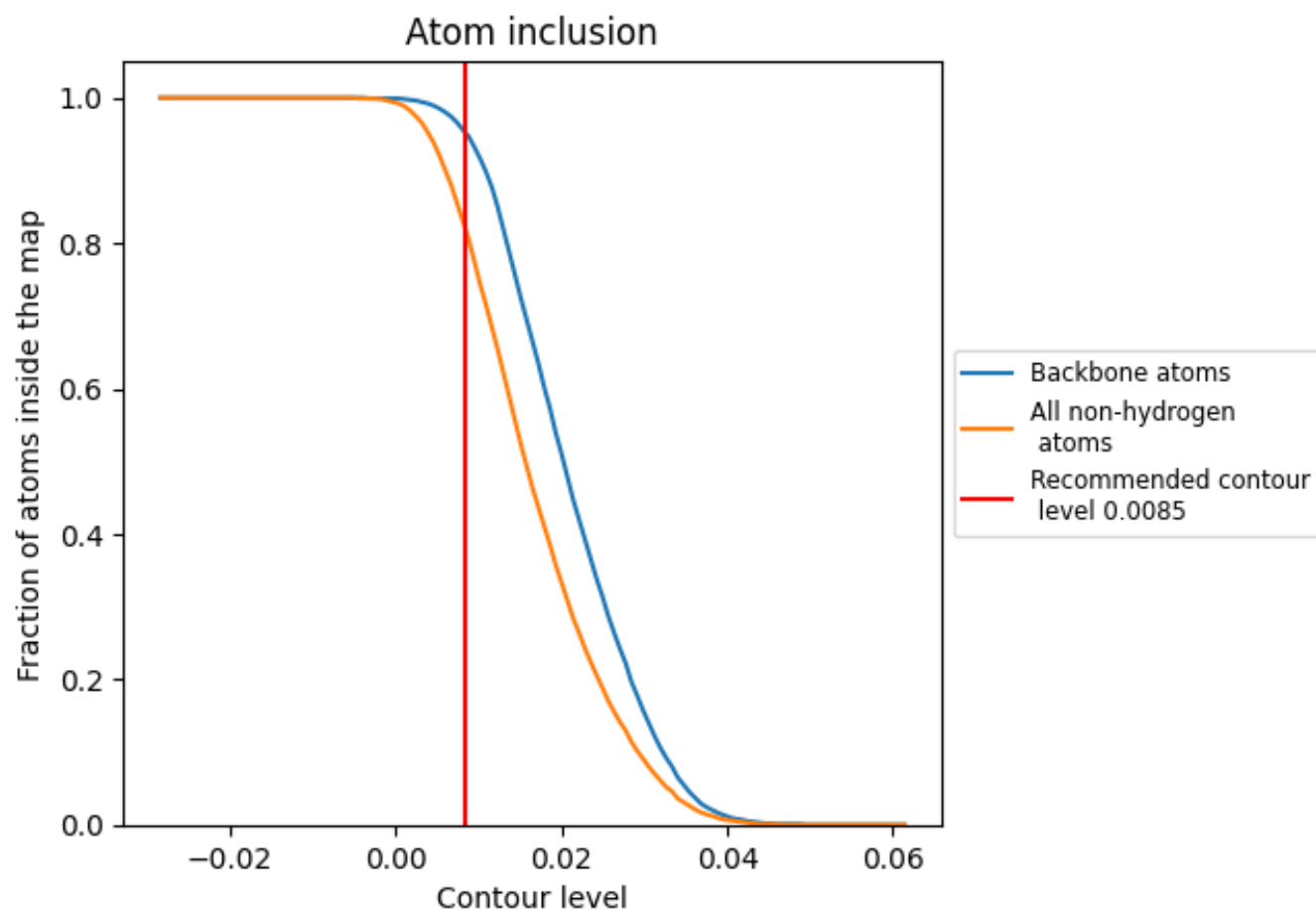
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions 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 (0.0085).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 95% of all backbone atoms, 82% 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 (0.0085) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.8170	0.4320
A	0.8170	0.4320

