



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 29, 2026 – 10:04 PM UTC

PDB ID : 6ZH8 / pdb_00006zh8
EMDB ID : EMD-11216
Title : Cryo-EM structure of DNA-PKcs:DNA
Authors : Chaplin, A.K.; Hardwick, S.W.; Chirgadze, D.Y.; Blundell, T.L.
Deposited on : 2020-06-21
Resolution : 4.14 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

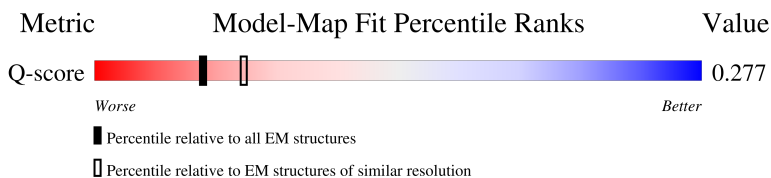
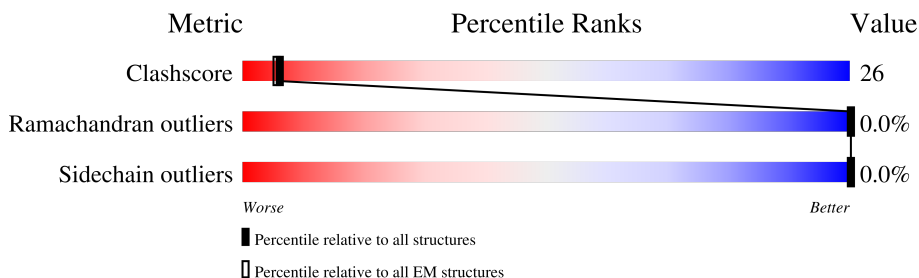
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 4.14 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	5577 (3.64 - 4.64)

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	4156	
2	B	11	
3	C	8	

2 Entry composition

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 29506 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 DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-PKcs.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	3694	Total	C	N	O	S	0	0
			29120	18668	4926	5333	193		

- Molecule 2 is a DNA chain called DNA (5'-D(P*AP*GP*TP*TP*TP*TP*TP*AP*GP*TP*T)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	B	11	Total	C	N	O	P	0	0
			222	106	34	71	11		

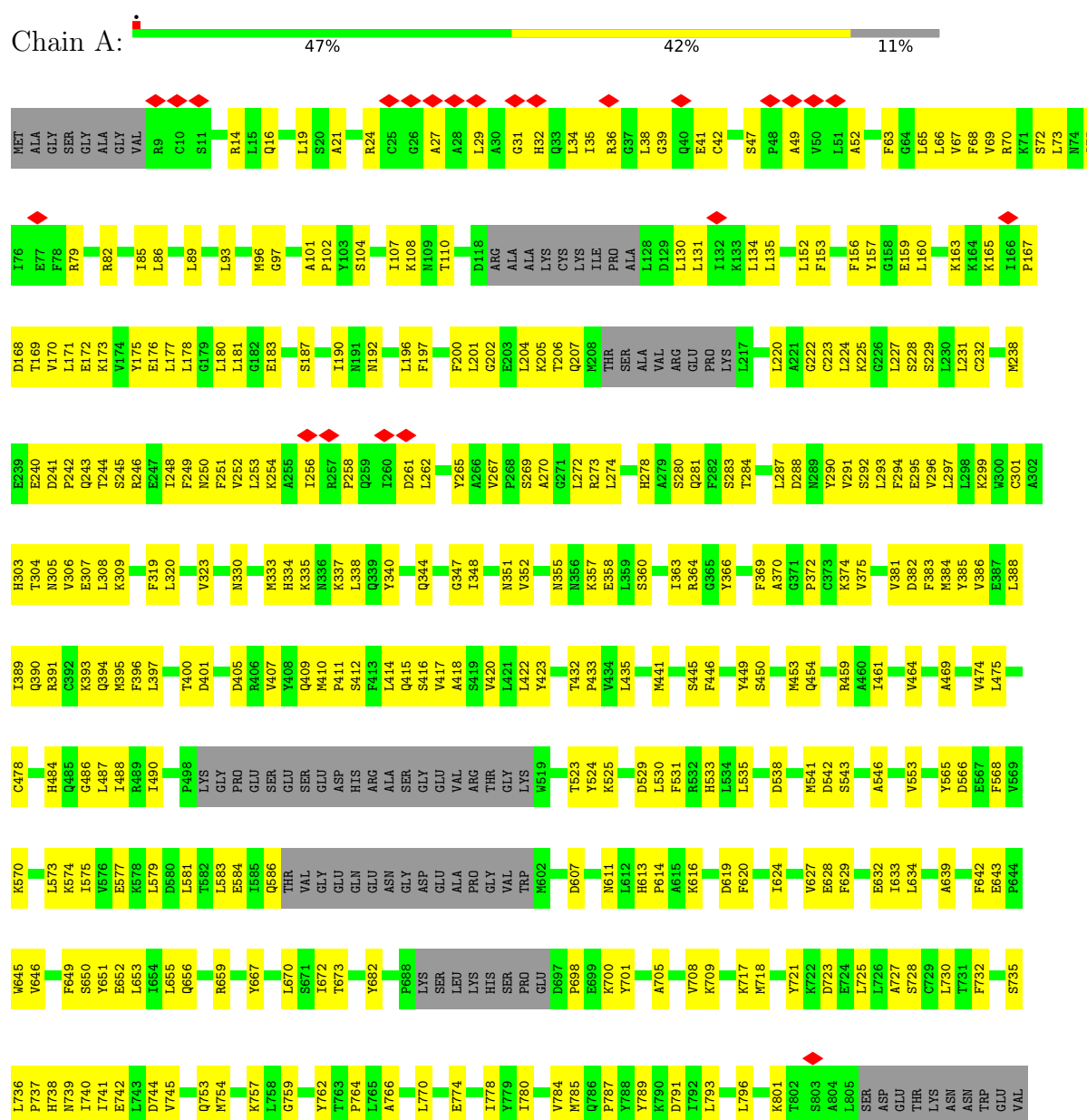
- Molecule 3 is a DNA chain called DNA (5'-D(P*AP*CP*TP*AP*AP*AP*AP*A)-3').

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
3	C	8	Total	C	N	O	P	0	0
			164	78	35	43	8		

3 Residue-property plots

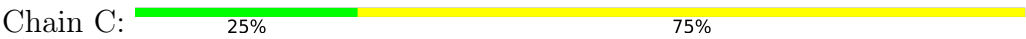
These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

- Molecule 1: DNA-dependent protein kinase catalytic subunit,DNA-PKCs





H3070	Q2979	L2897	L2816	ASP	THR	A2541	E2453	D2376	E2298	L2215	L2140	ARG	LYS
Q3074	T2987	P2902	M2820	GLN	LEU	L2542	L2454	R2377	Y2299	L2219	R2141	GLU	GLY
K3075	E2388	ALA	D2821	LYS	THR	L2545	N2456	F2378	F2300	M2220	R2142	GLN	ALA
L3078	A2989	LEU	D2821	LEU	THR	L2546	P2457	M2379	Q2301	M2220	R2143	ARG	ARG
E3079	E2990	GLY	L2821	THR	PHE	S2547	P2457	L2382	A2302	H2222	L2144	ASP	GLY
	K2991	LEU	K2824	LEU	ALA	L2550	E2460	F2383	V2304		K2148	THR	ALA
		PRO	T2825	LEU	HIS	E2551	F2461	F2384	M2307		L2151	VAL	ASN
Y3082	W2994	ALA	L2826	MET	GLY	E2551	S2466	L2386				HIS	GLY
S3083		TYR	L2826	TYR	GLY	E2551	T2467	L2386				ASP	ASP
	L2999	ARG	S2827	ALA	ARG	F2554	T2467	P2387	V2310		E2155	ASP	ASP
L3086	VAL	LYS	E2828	ARG	LEU	L2555	T2468		F2311	V2230	F2156	VAL	GLY
S3087	GLY	GLY	K2829	GLY	SER	S2556			K2313	R2232	R2158	LEU	PRO
	LYS	VAL	M2831	VAL	ALA	L2557	M2473	H2390	E2314	H2233	P2159	GLU	PRO
L3091	ALA	ALA	L2832	ALA	THR	A2558		G2391		R2233	F2159	LEU	TYR
D3097	ARG	ARG	T2833	GLU	GLN	L2561	L2476	V2392	E2314	N2234	P2160	GLU	TYR
	ARG	ARG	Q2834	GLU	ALA	L2562	L2477	K2394	Y2316	L2235	A2161	GLU	MET
K3100	X3009	LYS	Q2838	LYS	ALA	F2563	M2478	F2395	V2322	L2236	K2162	SER	SER
Y3101	L2920	ARG	R2842	ARG	LEU	L2563	V2479	L2396		L2237	L2165	LEU	LEU
Y3102	L2921	GLY		GLY	LYS	E2564	L2480	C2397	T2326	I2238	S2166	SER	LEU
I3103	L2922	GLU	R2842	VAL	ILE	M2565	D2481	L2398	L2327	K2239	P2167	TYR	TYR
	V2923	ILE	T2846	GLY	ALA	S2569		V2400		V2242	L2168	LEU	LEU
N3113	V2924	LYS	T2847	THR	THR	D2571	R2485	F2401	V2330	E2243	L2169	ALA	ALA
S3014	L2925	LYS	F2848	ASP	GLN	Y2572		L2402	C2403	C2244	Q2170	ASP	ASP
S3015	E2926	SER	S2849	GLY	GLN		D2482	C2403	L2337	E2245	L2171	SER	THR
T3016	L2926	GLY	F2850	GLY	GLN		D2482	R2404	L2337	C2246		THR	THR
A3017		LEU	F2851	GLY	GLN		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	L2929	LEU	F2851	GLY	GLN		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
L3027	Y2930	LEU	F2851	GLY	GLN		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
N3028	R2931	LEU	F2851	GLY	GLN		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
K3029	S2932	ASP	F2851	GLY	GLN		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
L3121	L2933	ASP	C2857	ASP	ALA		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
H3122	G2934	ALA	L2858	ALA	ALA		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	E2935	ALA	Q2768	ALA	ALA		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
R3125	S2935	ALA	D2860	GLY	GLY		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
L3126	P3034	GLY	L2861	THR	THR		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
		GLY	S2862	THR	THR		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
A3134	T3039	GLY	C2863	ASP	ASP		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
L3135		VAL	Q2864	VAL	VAL		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
T3136	F3042	ASP		ASP	ASP		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
I3137	Y3043	ASN	L2868	ASN	ASN		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
Q3139		LYS	L2868	LYS	LYS		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
E3140	R3046	GLY	S2870	GLY	GLY		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	T2952	ALA	L2871	ALA	ALA		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
G3149	S3047	GLY	D2872	GLY	GLY		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	K3048	GLY	P2873	GLY	GLY		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	L3049	ARG	A2874	ARG	ARG		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
S3152	L2958	THR	L2875	THR	THR		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	E2959	THR	V2876	THR	THR		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	E2960	ASP	S2877	ASP	ASP		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
K3158	Q3059	LEU		LEU	LEU		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
R3159	S3060	LEU	C2880	LEU	LEU		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	L3061	LEU	L2881	LEU	LEU		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
N3162	L3062	ARG		ARG	ARG		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
T3163	L3063	LEU	Q2886	LEU	LEU		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
W3164	F3064	ARG	Q2886	ARG	ARG		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
T3165	Q2971	THR	Q2889	THR	THR		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
N3166	Y2972	ARG	I2804	ARG	ARG		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
S3167	D3066	PHE	I2890	PHE	PHE		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
Y3168	K3067	THR	I2891	THR	THR		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
	A3068	ARG		ARG	ARG		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU
P3169	R3069	ARG	Q2807	ARG	ARG		D2482	R2404	E2338			LEU	LEU



A26
C27
T28
A29
A30
A31
A32
A33

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, C1	Depositor
Number of particles used	31881	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 ($e^-/\text{\AA}^2$)	52.97	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.445	Depositor
Minimum map value	-0.076	Depositor
Average map value	0.002	Depositor
Map value standard deviation	0.022	Depositor
Recommended contour level	0.125	Depositor
Map size (Å)	356.99997, 356.99997, 356.99997	wwPDB
Map dimensions	340, 340, 340	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	1.05, 1.05, 1.05	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.26	0/29582	0.44	2/40029 (0.0%)
2	B	0.23	0/247	0.44	0/378
3	C	0.24	0/185	0.37	0/282
All	All	0.26	0/30014	0.44	2/40689 (0.0%)

There are no bond length outliers.

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	3030	ILE	N-CA-C	-5.57	108.42	113.71
1	A	553	VAL	N-CA-C	-5.22	107.26	111.91

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

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	29120	0	29078	1434	0
2	B	222	0	117	10	0
3	C	164	0	87	6	0
All	All	29506	0	29282	1450	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 26.

All (1450) 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:3472:ILE:HG21	1:A:3483:MET:CE	1.65	1.25
1:A:3472:ILE:CG2	1:A:3483:MET:HE3	1.79	1.11
1:A:3472:ILE:CG2	1:A:3483:MET:CE	2.32	1.06
1:A:1351:THR:HG22	1:A:1353:PRO:HD2	1.48	0.95
1:A:3472:ILE:HG21	1:A:3483:MET:HE1	1.48	0.92
1:A:2452:ARG:HD2	1:A:2494:ASP:HB2	1.55	0.87
1:A:1662:ASN:H	1:A:1665:HIS:HE1	1.23	0.86
1:A:2123:PRO:HD2	1:A:2126:MET:HE2	1.58	0.85
1:A:2999:LEU:HD21	1:A:3016:THR:HB	1.58	0.84
1:A:175:TYR:O	1:A:178:LEU:HB3	1.79	0.83
1:A:3999:THR:HA	1:A:4002:MET:HE2	1.61	0.83
1:A:3284:SER:HB2	1:A:3301:LEU:HD12	1.60	0.83
1:A:3298:LEU:HD12	1:A:3333:THR:HG23	1.61	0.82
1:A:3679:ASN:HB3	1:A:3684:SER:HB2	1.61	0.81
1:A:1603:GLN:HG2	1:A:1606:ARG:HH12	1.47	0.80
1:A:3872:ARG:HH22	1:A:4114:PRO:HG3	1.47	0.80
1:A:2350:LYS:HA	1:A:2353:GLN:HB3	1.66	0.78
1:A:2589:TYR:HB2	1:A:2777:HIS:HB2	1.64	0.78
1:A:652:GLU:O	1:A:655:LEU:HB2	1.83	0.77
1:A:265:TYR:HB3	1:A:308:LEU:HD11	1.66	0.76
1:A:86:LEU:HD13	1:A:89:LEU:HD21	1.67	0.76
1:A:909:VAL:HG13	1:A:2807:GLN:HE21	1.50	0.76
1:A:1021:VAL:O	1:A:1026:ARG:NH2	2.20	0.75
1:A:2425:ARG:HE	1:A:2457:PRO:HB3	1.52	0.75
1:A:238:MET:HE1	1:A:284:THR:H	1.52	0.74
1:A:3417:ALA:HB2	1:A:3450:MET:HE3	1.69	0.74
1:A:980:THR:HA	1:A:983:LEU:HD12	1.70	0.74
1:A:1007:VAL:HG23	1:A:1010:LEU:HD12	1.70	0.74
1:A:1664:SER:H	1:A:1668:PHE:HB3	1.52	0.74
1:A:1828:LEU:O	1:A:1883:ARG:NH1	2.21	0.74
1:A:1539:SER:HA	1:A:1552:HIS:HA	1.68	0.74
1:A:1662:ASN:H	1:A:1665:HIS:CE1	2.05	0.74
1:A:1419:LEU:HB3	1:A:1467:ILE:HD12	1.70	0.73
1:A:2327:LEU:HA	1:A:2330:VAL:HG12	1.70	0.73
1:A:2542:LEU:HD21	1:A:2558:ALA:HB1	1.70	0.73
1:A:347:GLY:O	1:A:351:ASN:ND2	2.22	0.73
1:A:988:VAL:HA	1:A:991:LEU:HD12	1.71	0.72
1:A:3376:GLY:O	1:A:3379:GLN:NE2	2.22	0.72
1:A:240:GLU:O	1:A:243:GLN:NE2	2.23	0.72
1:A:1932:GLN:H	1:A:1937:ARG:HH22	1.35	0.72
1:A:3465:PHE:HA	1:A:3468:LEU:HD13	1.71	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3729:MET:O	1:A:3734:ARG:NH2	2.23	0.71
1:A:2962:ARG:HG2	1:A:3989:ARG:HH22	1.54	0.71
1:A:2258:GLU:HA	1:A:2261:SER:HB2	1.72	0.71
1:A:2519:LEU:O	1:A:2523:ASN:ND2	2.23	0.71
1:A:4085:LYS:O	1:A:4092:GLN:NE2	2.23	0.71
1:A:3631:LYS:O	1:A:3634:GLN:NE2	2.23	0.71
1:A:3545:THR:OG1	1:A:3549:HIS:NE2	2.21	0.71
1:A:3922:ASP:O	1:A:3923:ARG:NH1	2.24	0.71
1:A:745:VAL:HG21	1:A:785:MET:HE1	1.73	0.70
1:A:1834:ASP:OD1	1:A:1835:ALA:N	2.24	0.70
1:A:4006:VAL:HG12	1:A:4040:PRO:HB3	1.73	0.70
1:A:2429:ASP:O	1:A:2433:LYS:N	2.23	0.70
1:A:407:VAL:HA	1:A:410:MET:HG2	1.74	0.70
1:A:393:LYS:HG3	1:A:397:LEU:HD12	1.74	0.70
1:A:880:MET:HE1	1:A:883:TYR:HB2	1.74	0.70
1:A:1479:VAL:HA	1:A:1482:GLU:HB3	1.73	0.70
1:A:2155:GLU:HA	1:A:2158:ARG:HE	1.56	0.69
1:A:1660:SER:O	1:A:1665:HIS:NE2	2.25	0.69
1:A:6015:UNK:O	1:A:6019:UNK:N	2.25	0.69
1:A:1639:LEU:HA	1:A:1642:LYS:HG2	1.74	0.69
1:A:2393:LEU:HD13	1:A:2396:LEU:HD12	1.73	0.69
1:A:1372:LEU:HD21	1:A:1403:MET:HE1	1.74	0.69
1:A:1751:GLU:O	1:A:1788:ARG:NH2	2.26	0.69
1:A:2307:MET:HA	1:A:2316:TYR:HB2	1.73	0.69
1:A:3379:GLN:OE1	1:A:3383:GLN:NE2	2.26	0.69
1:A:227:LEU:O	1:A:231:LEU:N	2.26	0.69
1:A:1653:LEU:HD12	1:A:1695:LEU:HD12	1.74	0.68
1:A:245:SER:HA	1:A:248:ILE:HD12	1.75	0.68
1:A:849:GLU:OE1	1:A:849:GLU:N	2.22	0.68
1:A:370:ALA:O	1:A:374:LYS:N	2.27	0.68
1:A:2455:LEU:HD11	1:A:2498:ILE:HG23	1.76	0.68
1:A:2919:ASP:O	1:A:2923:TRP:N	2.23	0.68
1:A:3360:LEU:O	1:A:3364:GLY:N	2.26	0.68
1:A:3529:ILE:HG22	1:A:3533:PHE:HB2	1.76	0.68
1:A:3731:SER:O	1:A:3734:ARG:NH1	2.27	0.68
1:A:1014:LEU:HD21	1:A:1025:LEU:HD21	1.76	0.68
1:A:1640:GLU:HA	1:A:1643:MET:SD	2.34	0.68
1:A:2387:PRO:HA	1:A:2394:LYS:HZ3	1.58	0.68
1:A:3911:ILE:HD12	1:A:3937:VAL:HG13	1.75	0.68
1:A:918:ALA:O	1:A:927:LYS:NZ	2.21	0.68
1:A:355:ASN:HB3	1:A:358:GLU:HG3	1.74	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:374:LYS:HD2	1:A:423:TYR:HB3	1.75	0.67
1:A:130:LEU:HG	1:A:173:LYS:HZ3	1.59	0.67
1:A:1377:CYS:SG	1:A:1422:LYS:NZ	2.68	0.67
1:A:1565:GLU:N	1:A:1565:GLU:OE1	2.24	0.67
1:A:2243:GLU:O	1:A:2246:LYS:NZ	2.22	0.67
1:A:3702:PRO:HB2	1:A:3794:VAL:HG11	1.74	0.67
1:A:853:ILE:HG22	1:A:857:GLN:HE21	1.59	0.67
1:A:1812:LEU:O	1:A:1815:THR:N	2.27	0.67
1:A:2168:LEU:O	1:A:2171:LEU:HB3	1.94	0.67
1:A:4054:ALA:HA	1:A:4096:SER:HA	1.76	0.67
1:A:1202:ARG:NE	1:A:1210:ASP:OD2	2.27	0.67
1:A:3772:ASN:ND2	1:A:3787:GLN:OE1	2.27	0.67
1:A:3114:TYR:OH	1:A:3125:ARG:NH2	2.28	0.67
1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:OE1	2.26	0.67
1:A:1225:GLU:OE2	1:A:1236:LEU:N	2.25	0.67
1:A:2803:ILE:HA	1:A:2806:LYS:HE3	1.74	0.67
1:A:1164:CYS:SG	1:A:1165:LEU:N	2.65	0.67
1:A:1075:ARG:NH2	1:A:1117:ASP:OD2	2.28	0.67
1:A:1139:GLU:O	1:A:1142:HIS:ND1	2.28	0.67
1:A:3484:THR:HG22	1:A:3513:ALA:HA	1.76	0.67
1:A:2167:PRO:HA	1:A:2170:GLN:HB3	1.75	0.66
1:A:24:ARG:HH21	1:A:66:LEU:HD21	1.58	0.66
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:VAL:H	1.59	0.66
1:A:780:ILE:HG21	1:A:785:MET:HE3	1.77	0.66
1:A:996:THR:HG21	1:A:1039:TRP:HB3	1.77	0.66
1:A:2443:MET:HE2	1:A:2479:TRP:CE3	2.29	0.66
1:A:3699:LEU:HB2	1:A:3719:ILE:HD12	1.76	0.66
1:A:3730:ALA:HA	1:A:3734:ARG:HH22	1.59	0.66
1:A:1588:ASP:OD1	1:A:1589:ASN:N	2.26	0.66
1:A:1151:ARG:NH1	1:A:1163:LEU:O	2.29	0.66
1:A:2103:HIS:O	1:A:2107:SER:N	2.29	0.66
1:A:901:MET:HG2	1:A:903:PRO:HD3	1.77	0.65
1:A:4037:ASN:HB2	1:A:4039:TYR:CE2	2.31	0.65
1:A:1071:ASN:OD1	1:A:1073:PHE:N	2.28	0.65
1:A:197:PHE:HD1	1:A:227:LEU:HD22	1.62	0.65
1:A:2126:MET:HA	1:A:2129:LEU:HB2	1.77	0.65
1:A:1435:ASN:ND2	1:A:1444:ASP:OD2	2.28	0.65
1:A:1050:GLU:N	1:A:1050:GLU:OE1	2.30	0.65
1:A:1650:ALA:HA	1:A:1695:LEU:HD11	1.78	0.65
1:A:1775:GLU:HB3	1:A:1779:GLN:HE22	1.62	0.65
1:A:3134:ALA:HB2	1:A:3182:ILE:HG22	1.79	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3168:TYR:HD2	1:A:3241:LYS:HZ2	1.44	0.65
1:A:3321:LEU:HD13	1:A:3324:ARG:HH22	1.60	0.65
1:A:997:ASN:HB3	1:A:1000:LYS:HG2	1.77	0.65
1:A:2587:GLN:O	1:A:2777:HIS:N	2.30	0.65
1:A:75:SER:O	1:A:79:ARG:N	2.22	0.65
1:A:1398:VAL:HA	1:A:1401:ASN:HD22	1.62	0.65
1:A:1935:GLU:OE1	1:A:1935:GLU:N	2.29	0.65
1:A:542:ASP:O	1:A:546:ALA:N	2.30	0.65
1:A:1936:ARG:HA	1:A:1939:LEU:HD12	1.77	0.65
1:A:2973:ASP:OD1	1:A:2974:GLU:N	2.30	0.65
1:A:3472:ILE:CG2	1:A:3483:MET:HE1	2.15	0.65
1:A:163:LYS:NZ	1:A:168:ASP:OD2	2.22	0.64
1:A:3847:SER:HA	1:A:3857:LEU:HD22	1.79	0.64
1:A:1011:GLU:OE1	1:A:1011:GLU:N	2.29	0.64
1:A:2298:GLU:N	1:A:2298:GLU:OE1	2.26	0.64
1:A:4081:ALA:O	1:A:4090:ARG:NE	2.30	0.64
1:A:3569:GLN:NE2	1:A:3573:ASN:OD1	2.30	0.64
1:A:708:VAL:HG22	1:A:740:ILE:HG23	1.79	0.64
1:A:1511:ALA:HA	1:A:1514:LEU:HD12	1.80	0.64
1:A:3944:HIS:HB3	1:A:3948:SER:HB3	1.79	0.64
1:A:3353:GLU:HG3	1:A:3356:ALA:H	1.63	0.64
1:A:1634:ALA:H	1:A:1642:LYS:NZ	1.96	0.64
1:A:1594:SER:O	1:A:1598:ASN:ND2	2.31	0.64
1:A:19:LEU:HD11	1:A:38:LEU:HD22	1.79	0.64
1:A:295:GLU:O	1:A:299:LYS:HG2	1.98	0.64
1:A:3180:ASP:HA	1:A:3242:MET:HE1	1.80	0.64
1:A:319:PHE:HD2	1:A:320:LEU:HD22	1.63	0.63
1:A:2287:PRO:HG3	1:A:2326:ILE:HD12	1.80	0.63
1:A:529:ASP:O	1:A:533:HIS:ND1	2.31	0.63
1:A:566:ASP:HB3	1:A:570:LYS:HZ1	1.62	0.63
1:A:1676:ILE:O	1:A:1680:ALA:N	2.31	0.63
1:A:1681:ASP:HB2	1:A:1684:LEU:HD23	1.80	0.63
1:A:2162:LYS:HA	1:A:2165:LEU:HD23	1.81	0.63
1:A:2572:TYR:CE2	1:A:2788:SER:HB3	2.34	0.63
1:A:135:LEU:HA	1:A:177:LEU:HD21	1.79	0.63
1:A:1355:GLY:HA2	1:A:1358:LEU:HG	1.81	0.63
1:A:1949:ILE:HD11	1:A:2100:LEU:HB2	1.79	0.63
1:A:2522:ARG:O	1:A:2526:SER:N	2.23	0.63
1:A:251:PHE:HA	1:A:254:LYS:HG2	1.79	0.63
1:A:1248:PHE:O	1:A:1251:GLN:NE2	2.32	0.63
1:A:2123:PRO:HB2	1:A:2125:TRP:CD1	2.33	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3244:ASP:OD1	1:A:3247:ARG:NH1	2.25	0.63
1:A:3491:PRO:HB2	1:A:3494:GLN:HE22	1.63	0.63
1:A:3686:TRP:O	1:A:3689:ASP:N	2.31	0.63
1:A:2547:SER:HB3	1:A:2550:ILE:HG23	1.79	0.63
1:A:632:GLU:N	1:A:632:GLU:OE1	2.31	0.63
1:A:3472:ILE:HG22	1:A:3483:MET:HE3	1.77	0.63
1:A:1248:PHE:HB2	1:A:1309:ALA:HA	1.80	0.63
1:A:1439:PRO:HA	1:A:1442:GLN:HE22	1.62	0.63
1:A:2167:PRO:O	1:A:2171:LEU:N	2.31	0.63
1:A:2485:ARG:HH22	1:A:2530:ARG:HA	1.64	0.63
1:A:2098:THR:O	1:A:2102:LYS:HG2	1.98	0.63
1:A:2950:LYS:O	1:A:2954:GLN:NE2	2.29	0.63
1:A:1018:VAL:HB	1:A:1021:VAL:HB	1.81	0.62
1:A:1724:MET:HE1	1:A:1768:ARG:HH11	1.64	0.62
1:A:3728:VAL:HG12	1:A:3734:ARG:HH21	1.63	0.62
1:A:3981:TYR:OH	1:A:4105:LYS:NZ	2.32	0.62
1:A:229:SER:O	1:A:278:HIS:NE2	2.31	0.62
1:A:1581:GLU:O	1:A:1584:GLN:NE2	2.31	0.62
1:A:2245:TRP:HB3	1:A:2248:CYS:HB2	1.80	0.62
1:A:2338:GLU:OE1	1:A:2338:GLU:N	2.32	0.62
1:A:4080:VAL:O	1:A:4090:ARG:NH2	2.32	0.62
1:A:4039:TYR:HB2	1:A:4042:GLN:OE1	1.98	0.62
1:A:1118:GLU:HG2	1:A:1120:SER:H	1.63	0.62
1:A:2190:VAL:HA	1:A:2193:ILE:HG22	1.82	0.62
1:A:3365:SER:OG	1:A:3379:GLN:NE2	2.32	0.62
1:A:3091:LEU:O	1:A:3192:LYS:NZ	2.33	0.62
1:A:2523:ASN:HA	1:A:2526:SER:HB3	1.82	0.62
1:A:3608:LYS:O	1:A:3612:ARG:HG2	2.00	0.62
1:A:2213:ASN:OD1	1:A:2214:ARG:NH1	2.29	0.62
1:A:2234:ASN:HA	1:A:2237:ILE:HD12	1.82	0.62
1:A:2524:PHE:O	1:A:2530:ARG:NH1	2.31	0.62
1:A:3392:ALA:HB1	1:A:3409:VAL:HG13	1.81	0.62
1:A:320:LEU:HD12	1:A:369:PHE:HE2	1.64	0.61
1:A:1840:PHE:HA	1:A:1843:ILE:HG12	1.81	0.61
1:A:4012:ASP:OD1	1:A:4015:ASN:N	2.30	0.61
1:A:3087:SER:HB2	1:A:3102:TYR:HB2	1.82	0.61
1:A:3455:LYS:NZ	1:A:3489:SER:O	2.30	0.61
1:A:793:LEU:HA	1:A:796:LEU:HD23	1.82	0.61
1:A:2575:PRO:HA	1:A:2785:ILE:O	2.00	0.61
1:A:2806:LYS:HB2	1:A:2857:CYS:HB2	1.83	0.61
1:A:3491:PRO:O	1:A:3494:GLN:NE2	2.33	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:21:ALA:HA	1:A:24:ARG:HB2	1.82	0.61
1:A:698:PRO:HA	1:A:701:TYR:HD2	1.64	0.61
1:A:1851:LEU:HD21	1:A:1870:LYS:HA	1.82	0.61
1:A:4092:GLN:N	1:A:4092:GLN:OE1	2.34	0.61
1:A:860:GLY:HA3	1:A:3136:THR:HG21	1.82	0.61
1:A:1082:PHE:HA	1:A:1085:ILE:HG12	1.82	0.61
1:A:3796:MET:HE1	1:A:3802:LEU:HG	1.82	0.61
1:A:1221:ILE:O	1:A:1225:GLU:N	2.33	0.61
1:A:1583:MET:HE1	1:A:1626:TRP:HA	1.83	0.61
1:A:2830:ASN:O	1:A:2834:GLN:HG2	2.01	0.61
1:A:3807:GLU:OE1	1:A:3807:GLU:N	2.33	0.61
1:A:941:MET:HE2	1:A:958:MET:HE1	1.83	0.60
1:A:2555:LEU:HD11	1:A:2854:PHE:HD1	1.66	0.60
1:A:3390:GLN:HA	1:A:3393:GLU:HG2	1.83	0.60
1:A:997:ASN:HD21	1:A:999:LYS:HE2	1.65	0.60
1:A:3472:ILE:HG21	1:A:3483:MET:SD	2.41	0.60
1:A:1362:ASP:O	1:A:1365:ASN:ND2	2.34	0.60
1:A:3727:THR:HG23	1:A:3737:ARG:HB3	1.82	0.60
1:A:388:LEU:HD21	1:A:417:VAL:HG22	1.84	0.60
1:A:1083:ASN:ND2	1:A:1126:GLN:OE1	2.34	0.60
1:A:1290:LEU:HD22	1:A:1291:LEU:HD12	1.81	0.60
1:A:3313:SER:HA	1:A:3316:LEU:HB2	1.82	0.60
1:A:3585:PHE:HD2	1:A:3670:MET:HE1	1.67	0.60
1:A:1181:THR:O	1:A:1185:HIS:ND1	2.33	0.60
1:A:3630:ARG:HA	1:A:3633:ILE:HG12	1.83	0.60
1:A:2298:GLU:HA	1:A:2301:GLN:HG2	1.83	0.60
1:A:2930:TYR:O	1:A:2934:GLY:N	2.34	0.60
1:A:2969:ALA:HB1	1:A:3002:TYR:HE1	1.66	0.60
1:A:449:TYR:O	1:A:454:GLN:NE2	2.34	0.60
1:A:1047:GLN:OE1	1:A:1047:GLN:N	2.30	0.60
1:A:1506:SER:O	1:A:1509:GLN:NE2	2.35	0.60
1:A:1803:GLU:O	1:A:1807:LYS:N	2.35	0.60
1:A:3975:LYS:HG3	1:A:3976:GLU:H	1.65	0.60
1:A:192:ASN:O	1:A:196:LEU:HG	2.02	0.59
1:A:1444:ASP:HA	1:A:1447:ARG:NE	2.17	0.59
1:A:3992:ARG:HH12	1:A:4053:GLY:HA2	1.66	0.59
1:A:220:LEU:HA	1:A:223:CYS:HB3	1.83	0.59
1:A:412:SER:O	1:A:415:GLN:HB3	2.02	0.59
1:A:1595:ALA:HA	1:A:1598:ASN:HD22	1.66	0.59
1:A:2991:LYS:HA	1:A:2994:TRP:CE3	2.37	0.59
1:A:242:PRO:HB2	1:A:246:ARG:HH12	1.67	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:990:GLN:HB3	1:A:2781:PRO:HD3	1.84	0.59
1:A:1591:LYS:O	1:A:1594:SER:OG	2.20	0.59
1:A:1624:GLN:O	1:A:1627:LYS:NZ	2.33	0.59
1:A:3173:MET:SD	1:A:3782:SER:OG	2.59	0.59
1:A:3878:VAL:O	1:A:3965:ARG:NH2	2.31	0.59
1:A:204:LEU:HB3	1:A:224:LEU:HD11	1.84	0.59
1:A:1071:ASN:HB3	1:A:1074:LYS:HG3	1.85	0.59
1:A:1826:THR:O	1:A:1830:HIS:ND1	2.30	0.59
1:A:256:ILE:H	1:A:258:PRO:HD2	1.66	0.59
1:A:3466:PRO:HB2	1:A:4004:VAL:HG21	1.85	0.59
1:A:1458:LEU:O	1:A:1462:GLY:N	2.36	0.59
1:A:1589:ASN:HD21	1:A:1592:MET:HG2	1.67	0.59
1:A:975:ASP:OD1	1:A:976:VAL:N	2.35	0.59
1:A:1202:ARG:HH21	1:A:1207:TRP:HA	1.67	0.59
1:A:2579:HIS:ND1	1:A:2580:PRO:O	2.36	0.59
3:C:31:DA:H2"	3:C:32:DA:C8	2.38	0.59
1:A:1649:LEU:HA	1:A:1652:ILE:HD12	1.84	0.59
1:A:1373:VAL:HG21	1:A:1418:HIS:HB3	1.84	0.59
1:A:2583:GLU:N	1:A:2583:GLU:OE1	2.33	0.59
1:A:330:ASN:HB3	1:A:333:MET:HG3	1.85	0.58
1:A:1803:GLU:HA	1:A:1806:ARG:HB3	1.85	0.58
1:A:3118:ASP:OD1	1:A:3119:VAL:N	2.36	0.58
1:A:873:VAL:O	1:A:877:ASP:N	2.37	0.58
1:A:3032:SER:HB3	1:A:3074:GLN:HG3	1.84	0.58
1:A:374:LYS:NZ	1:A:423:TYR:O	2.35	0.58
1:A:1476:HIS:CG	1:A:1521:PHE:HD2	2.22	0.58
1:A:2276:LEU:O	1:A:2279:ILE:HG22	2.03	0.58
1:A:2339:GLU:OE1	1:A:2339:GLU:N	2.29	0.58
1:A:1009:LEU:O	1:A:1013:ILE:N	2.29	0.58
1:A:1205:ASN:OD1	1:A:1275:THR:HA	2.04	0.58
1:A:1802:TYR:OH	1:A:1846:ASP:OD2	2.21	0.58
1:A:2175:GLU:HG3	1:A:2176:ASN:H	1.69	0.58
1:A:2269:ASP:OD1	1:A:2269:ASP:N	2.36	0.58
1:A:3164:TRP:HB3	1:A:3186:ARG:NH2	2.19	0.58
1:A:3313:SER:O	1:A:3317:SER:N	2.33	0.58
1:A:3420:CYS:SG	1:A:3446:VAL:HG22	2.44	0.58
1:A:1369:MET:HA	1:A:1372:LEU:HB3	1.86	0.58
1:A:2261:SER:O	1:A:2270:ASN:ND2	2.33	0.58
1:A:19:LEU:HD21	1:A:38:LEU:HD13	1.86	0.58
1:A:396:PHE:CE1	1:A:410:MET:HE1	2.39	0.58
1:A:753:GLN:NE2	1:A:791:ASP:O	2.35	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3228:SER:O	1:A:3232:ARG:NE	2.33	0.58
1:A:3686:TRP:CD1	1:A:3689:ASP:HB2	2.39	0.58
1:A:1506:SER:HA	1:A:1509:GLN:HE21	1.69	0.58
1:A:295:GLU:OE2	1:A:340:TYR:OH	2.21	0.57
1:A:1772:HIS:N	1:A:1775:GLU:OE2	2.37	0.57
1:A:3369:ASP:OD1	1:A:3370:SER:N	2.36	0.57
1:A:3965:ARG:HG2	1:A:3969:ASN:ND2	2.19	0.57
1:A:639:ALA:HB1	1:A:642:PHE:HB3	1.86	0.57
1:A:1092:GLU:OE1	1:A:1095:LEU:N	2.27	0.57
1:A:2183:HIS:HE1	1:A:2186:VAL:HG23	1.69	0.57
1:A:542:ASP:OD1	1:A:543:SER:N	2.38	0.57
1:A:2274:ILE:HA	1:A:2277:LEU:HD12	1.86	0.57
1:A:2540:LEU:HD21	1:A:2832:ILE:HD11	1.84	0.57
1:A:2824:LYS:O	1:A:2829:LYS:NZ	2.35	0.57
1:A:2860:ASP:OD1	1:A:2864:GLN:NE2	2.37	0.57
1:A:3759:ARG:NH2	1:A:4010:SER:O	2.36	0.57
1:A:180:LEU:O	1:A:183:GLU:HB3	2.04	0.57
1:A:888:ARG:HB3	1:A:3889:ARG:HH21	1.69	0.57
1:A:3295:GLU:H	1:A:3295:GLU:CD	2.12	0.57
1:A:941:MET:HE1	1:A:962:TYR:CE1	2.40	0.57
1:A:1467:ILE:HG12	1:A:1468:LEU:HG	1.86	0.57
1:A:1935:GLU:HB2	1:A:1938:ARG:HH21	1.69	0.57
1:A:2243:GLU:N	1:A:2243:GLU:OE1	2.37	0.57
1:A:3384:HIS:O	1:A:3387:GLU:HG2	2.04	0.57
1:A:2517:LEU:HA	1:A:2520:ILE:HD12	1.86	0.57
1:A:3384:HIS:ND1	1:A:3387:GLU:OE2	2.37	0.57
1:A:3945:ALA:H	1:A:3948:SER:HB3	1.70	0.57
1:A:1873:TYR:HA	1:A:1876:ILE:HD12	1.87	0.57
1:A:2205:VAL:HG12	1:A:2207:LYS:H	1.68	0.57
1:A:1382:ILE:HD11	1:A:1384:PHE:HE1	1.69	0.57
1:A:1388:ASP:HA	1:A:1391:VAL:HG12	1.85	0.57
1:A:2269:ASP:O	1:A:2272:VAL:HG22	2.05	0.57
1:A:861:SER:O	1:A:3167:ARG:NH1	2.37	0.57
1:A:3636:PHE:HZ	1:A:3673:ASP:HB2	1.69	0.57
1:A:2130:HIS:CE1	1:A:2167:PRO:HG3	2.39	0.57
1:A:93:LEU:HA	1:A:97:GLY:HA3	1.86	0.56
1:A:484:HIS:O	1:A:488:ILE:HG12	2.04	0.56
1:A:1049:GLN:HE21	1:A:1056:THR:H	1.53	0.56
1:A:3809:THR:HB	1:A:3929:MET:SD	2.44	0.56
1:A:386:VAL:O	1:A:390:GLN:HG2	2.04	0.56
1:A:2406:GLU:OE1	1:A:2406:GLU:N	2.32	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3062:LEU:HA	1:A:3065:ILE:HG22	1.86	0.56
1:A:3174:ASP:O	1:A:3249:GLN:NE2	2.38	0.56
1:A:290:TYR:CZ	1:A:337:LYS:HG3	2.39	0.56
1:A:355:ASN:HD21	1:A:357:LYS:HB2	1.68	0.56
1:A:1175:HIS:HB3	1:A:1178:ARG:HD2	1.86	0.56
1:A:1444:ASP:OD1	1:A:1445:ARG:N	2.38	0.56
1:A:2298:GLU:H	1:A:2298:GLU:CD	2.13	0.56
1:A:3281:CYS:HB2	1:A:3329:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:3758:LEU:HB2	1:A:3795:PRO:HB3	1.87	0.56
1:A:3771:MET:HE1	1:A:3998:LEU:HG	1.88	0.56
1:A:6005:UNK:O	1:A:6009:UNK:N	2.38	0.56
1:A:1980:ASN:HB3	1:A:1982:ILE:HG12	1.87	0.56
1:A:2185:MET:O	1:A:2189:ILE:HG12	2.06	0.56
1:A:2348:GLN:HE21	1:A:2352:HIS:CE1	2.23	0.56
1:A:3370:SER:HA	1:A:3373:VAL:HG22	1.88	0.56
1:A:3627:ALA:HB3	1:A:3684:SER:HA	1.88	0.56
1:A:975:ASP:O	1:A:981:ARG:NH2	2.38	0.56
1:A:134:LEU:HD12	1:A:173:LYS:NZ	2.21	0.56
1:A:1971:PRO:O	1:A:1975:LEU:N	2.26	0.56
1:A:2159:PRO:O	1:A:2162:LYS:NZ	2.38	0.56
1:A:3875:GLU:O	1:A:3965:ARG:NH1	2.39	0.56
1:A:287:LEU:HD13	1:A:290:TYR:HB3	1.88	0.56
1:A:304:THR:HA	1:A:309:LYS:HE2	1.87	0.56
1:A:1583:MET:HE3	1:A:1629:CYS:HB2	1.88	0.56
1:A:1793:THR:O	1:A:1797:LEU:HG	2.06	0.56
1:A:3723:ASP:OD1	1:A:3724:GLU:N	2.39	0.56
1:A:1531:LEU:HA	1:A:1534:ASN:ND2	2.21	0.56
1:A:1575:LEU:HD11	1:A:1617:LYS:HG3	1.87	0.56
1:A:1597:LEU:O	1:A:1601:LEU:HG	2.06	0.56
1:A:2350:LYS:NZ	1:A:2353:GLN:O	2.38	0.56
1:A:3643:HIS:CE1	1:A:3644:PHE:CE1	2.94	0.56
1:A:1652:ILE:O	1:A:1655:ILE:HG22	2.06	0.56
1:A:2494:ASP:OD1	1:A:2495:SER:N	2.38	0.56
1:A:1038:LYS:HZ2	1:A:1039:TRP:CD1	2.23	0.55
1:A:1059:LEU:O	1:A:1063:LEU:HG	2.06	0.55
1:A:718:MET:HE1	1:A:754:MET:HG3	1.87	0.55
1:A:1204:PRO:O	1:A:1208:LEU:HB3	2.06	0.55
1:A:1816:ARG:HA	1:A:1819:PHE:CD2	2.40	0.55
1:A:614:PRO:HG3	1:A:620:PHE:CE2	2.42	0.55
1:A:1441:ALA:H	1:A:1445:ARG:HH21	1.55	0.55
1:A:2349:LEU:HA	1:A:2352:HIS:NE2	2.21	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2537:ASP:HA	1:A:2540:LEU:HG	1.88	0.55
1:A:1914:THR:O	1:A:1918:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:2337:LEU:HD23	1:A:2341:LEU:HB2	1.87	0.55
1:A:3722:PHE:O	1:A:3741:ARG:NH1	2.40	0.55
1:A:3962:ARG:NH2	1:A:4125:GLU:O	2.39	0.55
1:A:3969:ASN:O	1:A:3972:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:1816:ARG:HA	1:A:1819:PHE:CE2	2.41	0.55
1:A:3384:HIS:HA	1:A:3387:GLU:CD	2.32	0.55
1:A:3616:ALA:O	1:A:3629:ARG:NH2	2.39	0.55
1:A:4057:ALA:HB2	1:A:4090:ARG:HD2	1.88	0.55
1:A:2140:LEU:O	1:A:2144:LEU:HD23	2.07	0.55
1:A:3170:ASP:OD2	1:A:3173:MET:N	2.39	0.55
1:A:3772:ASN:HD21	1:A:3788:LEU:HB2	1.71	0.55
1:A:1238:GLN:OE1	1:A:1238:GLN:N	2.39	0.55
1:A:1920:TYR:HA	1:A:1923:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:2196:TRP:HB2	1:A:2200:ALA:HB2	1.88	0.55
1:A:2859:GLN:O	1:A:2862:SER:OG	2.22	0.55
1:A:299:LYS:O	1:A:303:HIS:N	2.39	0.55
1:A:739:ASN:HA	1:A:742:GLU:CD	2.31	0.55
1:A:1093:GLU:OE1	1:A:1093:GLU:N	2.30	0.55
1:A:1386:ILE:HG23	1:A:1387:GLY:H	1.72	0.55
1:A:1412:LYS:HA	1:A:1415:LEU:HB3	1.89	0.55
1:A:2310:VAL:HG12	1:A:2311:ARG:H	1.71	0.55
1:A:2376:ASP:HA	1:A:2379:MET:HG2	1.88	0.55
1:A:2919:ASP:OD1	1:A:2920:VAL:N	2.40	0.55
1:A:1251:GLN:OE1	1:A:1253:THR:OG1	2.24	0.55
1:A:2202:PRO:HB2	1:A:2208:ASP:HB3	1.89	0.55
1:A:3713:PRO:O	1:A:3716:HIS:NE2	2.40	0.55
1:A:723:ASP:O	1:A:727:ALA:HB2	2.07	0.55
1:A:1568:ASN:OD1	1:A:1569:THR:N	2.40	0.55
1:A:2353:GLN:HB2	1:A:2360:PHE:CE1	2.42	0.55
1:A:2357:GLU:O	1:A:2361:ILE:HG13	2.07	0.55
1:A:3288:SER:C	1:A:3289:ARG:HD2	2.31	0.55
1:A:4023:LYS:HG3	1:A:4025:GLY:HA3	1.89	0.55
1:A:538:ASP:N	1:A:538:ASP:OD1	2.40	0.54
1:A:907:LEU:HA	1:A:910:PHE:HD2	1.71	0.54
1:A:2587:GLN:N	1:A:2777:HIS:O	2.39	0.54
1:A:3319:ASN:OD1	1:A:3320:ILE:N	2.39	0.54
1:A:69:VAL:O	1:A:72:SER:OG	2.25	0.54
1:A:1239:PRO:HD2	1:A:1243:TYR:OH	2.07	0.54
1:A:2365:ASN:HD22	1:A:2396:LEU:HB3	1.70	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2569:SER:OG	1:A:2571:ASP:OD1	2.22	0.54
1:A:2851:PHE:HB3	1:A:2854:PHE:HB3	1.89	0.54
1:A:4054:ALA:O	1:A:4103:GLN:NE2	2.40	0.54
1:A:3162:ASN:HA	1:A:3165:THR:HG22	1.88	0.54
1:A:3946:PHE:HE2	1:A:4006:VAL:HG22	1.72	0.54
1:A:1790:SER:HB3	1:A:1793:THR:HG23	1.89	0.54
1:A:1933:LEU:H	1:A:1937:ARG:NH1	2.05	0.54
1:A:3188:PHE:CZ	1:A:3192:LYS:HD2	2.42	0.54
1:A:2220:MET:HE1	1:A:2255:LEU:HB3	1.88	0.54
1:A:2271:SER:HA	1:A:2274:ILE:HD12	1.90	0.54
1:A:3493:TRP:NE1	1:A:3494:GLN:OE1	2.41	0.54
1:A:3923:ARG:O	1:A:3962:ARG:NH1	2.40	0.54
1:A:1404:LYS:HA	1:A:1407:LYS:HG2	1.89	0.54
1:A:1711:ARG:NH2	1:A:1757:MET:O	2.38	0.54
1:A:1769:GLU:O	1:A:1822:ARG:NH2	2.37	0.54
1:A:2364:LEU:HD11	1:A:2375:ALA:HB2	1.89	0.54
1:A:2796:ALA:O	1:A:2800:ARG:NH2	2.32	0.54
1:A:3619:ASP:O	1:A:3621:LYS:N	2.40	0.54
1:A:306:VAL:HG22	1:A:307:GLU:HG2	1.89	0.54
1:A:997:ASN:OD1	1:A:998:ASN:N	2.41	0.54
1:A:1724:MET:HE1	1:A:1768:ARG:HD3	1.90	0.54
1:A:1952:ILE:HA	1:A:1955:VAL:HG12	1.90	0.54
1:A:2273:GLY:HA2	1:A:2276:LEU:HD12	1.90	0.54
1:A:2436:LEU:HD21	1:A:2461:PHE:HE2	1.72	0.54
1:A:3039:THR:O	1:A:3042:PRO:HD2	2.08	0.54
1:A:3988:LEU:HD23	1:A:4100:GLU:HB2	1.90	0.54
1:A:232:CYS:HB2	1:A:278:HIS:CD2	2.43	0.54
1:A:249:PHE:O	1:A:252:VAL:HG22	2.08	0.54
1:A:197:PHE:CD1	1:A:227:LEU:HD22	2.43	0.54
1:A:1476:HIS:HB2	1:A:1479:VAL:HG22	1.90	0.54
1:A:3610:TYR:OH	1:A:3645:GLY:O	2.23	0.54
1:A:3660:ASN:O	1:A:3664:ASN:ND2	2.40	0.54
1:A:3842:TRP:O	1:A:3846:MET:HE3	2.08	0.54
1:A:1049:GLN:HG2	1:A:1055:ASN:HB2	1.90	0.53
1:A:1069:HIS:CG	1:A:1074:LYS:HD2	2.43	0.53
1:A:3834:ALA:O	1:A:3838:GLU:N	2.29	0.53
1:A:4089:ILE:HA	1:A:4092:GLN:NE2	2.23	0.53
1:A:290:TYR:CE2	1:A:337:LYS:HG3	2.42	0.53
1:A:524:TYR:CZ	1:A:525:LYS:HG3	2.43	0.53
1:A:1764:GLU:OE2	1:A:1768:ARG:NH2	2.42	0.53
1:A:2279:ILE:O	1:A:2282:ALA:HB3	2.07	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3168:TYR:HE1	1:A:3186:ARG:HH22	1.56	0.53
1:A:3455:LYS:HZ3	1:A:3491:PRO:HD3	1.73	0.53
3:C:30:DA:H2"	3:C:31:DA:N7	2.24	0.53
1:A:1493:PRO:HD2	1:A:1500:LEU:HB3	1.90	0.53
1:A:2547:SER:O	1:A:2550:ILE:HG12	2.07	0.53
1:A:3680:LEU:HD12	1:A:3726:VAL:HG23	1.90	0.53
1:A:135:LEU:HD11	1:A:176:GLU:HB2	1.88	0.53
1:A:3661:ASP:HA	1:A:3664:ASN:HD21	1.73	0.53
1:A:3820:MET:HA	1:A:3885:ARG:HH21	1.72	0.53
1:A:774:GLU:O	1:A:778:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:1388:ASP:CG	1:A:1392:MET:HE2	2.33	0.53
1:A:3243:ILE:HD11	1:A:3258:LEU:HB3	1.91	0.53
1:A:16:GLN:NE2	1:A:41:GLU:OE1	2.41	0.53
1:A:2273:GLY:O	1:A:2276:LEU:HB2	2.08	0.53
1:A:2872:ASP:OD2	1:A:2875:ALA:N	2.34	0.53
1:A:3158:LYS:O	1:A:3162:ASN:ND2	2.41	0.53
1:A:3643:HIS:HE1	1:A:3644:PHE:CE1	2.27	0.53
1:A:2466:SER:C	1:A:2468:THR:H	2.15	0.53
1:A:3685:PRO:HB2	1:A:3687:MET:H	1.74	0.53
1:A:4055:ASN:HB3	1:A:4058:VAL:HG23	1.90	0.53
1:A:287:LEU:HG	1:A:334:HIS:CD2	2.44	0.53
1:A:394:GLN:OE1	1:A:1738:ASN:ND2	2.42	0.53
1:A:652:GLU:HA	1:A:655:LEU:HD22	1.89	0.53
1:A:1150:LYS:NZ	1:A:1161:ALA:O	2.27	0.53
1:A:2244:CYS:HG	1:A:2245:TRP:CG	2.27	0.53
1:A:2987:THR:HG23	1:A:2989:ALA:H	1.72	0.53
1:A:3347:CYS:HA	1:A:3350:GLU:HB3	1.90	0.53
1:A:3729:MET:N	1:A:3729:MET:HE2	2.24	0.53
1:A:14:ARG:HD3	1:A:2390:HIS:HB3	1.90	0.53
1:A:1100:VAL:O	1:A:1104:LEU:HD23	2.09	0.53
1:A:1297:PHE:CZ	1:A:1301:ILE:HD13	2.44	0.53
1:A:3113:ASN:O	1:A:3116:SER:OG	2.22	0.53
1:A:3159:ARG:HA	1:A:3162:ASN:HD21	1.73	0.53
1:A:3577:GLN:OE1	1:A:3629:ARG:NH1	2.42	0.53
1:A:1215:GLU:OE1	1:A:1219:PHE:HB3	2.09	0.53
1:A:1416:GLU:HA	1:A:1419:LEU:HB2	1.91	0.53
1:A:1426:GLN:NE2	1:A:1429:GLU:OE1	2.43	0.53
1:A:1473:THR:OG1	1:A:1474:ASP:N	2.42	0.53
1:A:2244:CYS:HG	1:A:2245:TRP:CD1	2.26	0.53
1:A:2534:ASN:O	1:A:2538:ARG:N	2.37	0.53
1:A:1396:PRO:HA	1:A:1399:CYS:HB2	1.90	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2158:ARG:HA	1:A:2196:TRP:CZ3	2.45	0.52
1:A:3028:ASN:C	1:A:3030:ILE:H	2.16	0.52
1:A:3901:ARG:HG3	1:A:3970:LEU:HD11	1.90	0.52
3:C:30:DA:H2"	3:C:31:DA:C8	2.43	0.52
1:A:168:ASP:OD2	1:A:171:LEU:HD13	2.10	0.52
1:A:171:LEU:H	1:A:171:LEU:HD23	1.74	0.52
1:A:1565:GLU:HA	1:A:1568:ASN:HD21	1.74	0.52
1:A:1703:THR:N	1:A:1706:SER:OG	2.42	0.52
1:A:1711:ARG:NH2	1:A:1761:LEU:HB2	2.24	0.52
1:A:1775:GLU:HA	1:A:1778:PHE:CD2	2.44	0.52
1:A:3786:LEU:HD12	1:A:3910:LEU:HD22	1.89	0.52
1:A:240:GLU:HB2	1:A:243:GLN:HE22	1.73	0.52
1:A:1537:VAL:HA	1:A:1554:SER:HA	1.91	0.52
1:A:3149:GLY:O	1:A:3152:SER:OG	2.26	0.52
3:C:28:DT:H2"	3:C:29:DA:C8	2.45	0.52
1:A:629:PHE:CZ	1:A:633:ILE:HG13	2.44	0.52
1:A:2391:GLY:O	1:A:2431:ARG:NH2	2.42	0.52
1:A:248:ILE:HA	1:A:251:PHE:CE2	2.45	0.52
1:A:850:GLU:HA	1:A:853:ILE:HD12	1.92	0.52
1:A:1662:ASN:N	1:A:1665:HIS:HE1	2.01	0.52
1:A:4003:ASP:OD1	1:A:4004:VAL:N	2.43	0.52
1:A:1590:THR:HG23	1:A:1632:TRP:CE2	2.44	0.52
1:A:2897:LEU:HD21	1:A:2923:TRP:CE2	2.44	0.52
1:A:261:ASP:OD1	1:A:262:LEU:N	2.42	0.52
1:A:390:GLN:O	1:A:394:GLN:HG3	2.10	0.52
1:A:1404:LYS:HA	1:A:1407:LYS:HE3	1.92	0.52
1:A:2452:ARG:NH1	1:A:2497:GLU:OE1	2.43	0.52
1:A:3182:ILE:HG13	1:A:3183:ILE:N	2.25	0.52
1:A:3340:ALA:O	1:A:3343:SER:OG	2.21	0.52
1:A:3684:SER:HB3	1:A:3685:PRO:HD3	1.91	0.52
1:A:86:LEU:O	1:A:89:LEU:HG	2.10	0.52
1:A:643:GLU:HA	1:A:646:VAL:HG23	1.91	0.52
1:A:895:ALA:HA	1:A:904:VAL:HG12	1.91	0.52
1:A:1754:GLN:HA	1:A:1785:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:2121:ASP:OD1	1:A:2121:ASP:N	2.41	0.52
1:A:2485:ARG:NH1	1:A:2529:THR:HG22	2.25	0.52
1:A:2960:GLU:OE2	1:A:2972:TYR:OH	2.26	0.52
1:A:3605:ASN:OD1	1:A:3606:ILE:N	2.43	0.52
1:A:3962:ARG:NH2	1:A:4124:TRP:O	2.27	0.52
1:A:4074:PHE:HA	1:A:4077:TYR:HD2	1.75	0.52
1:A:171:LEU:N	1:A:172:GLU:OE1	2.42	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1932:GLN:N	1:A:1937:ARG:HH22	2.05	0.51
1:A:2439:ILE:HG23	1:A:2454:LEU:HD21	1.91	0.51
1:A:3492:CYS:SG	1:A:3521:ILE:HB	2.50	0.51
1:A:3593:ARG:HH12	1:A:3656:LEU:HA	1.75	0.51
1:A:3685:PRO:HG2	1:A:3687:MET:HB3	1.92	0.51
2:B:23:DT:H1'	2:B:24:DT:C2	2.46	0.51
1:A:382:ASP:OD1	1:A:383:PHE:N	2.43	0.51
1:A:1516:GLU:O	1:A:1520:ALA:N	2.43	0.51
1:A:2842:ARG:O	1:A:2846:THR:HG22	2.10	0.51
1:A:1442:GLN:O	1:A:1446:SER:N	2.40	0.51
1:A:1454:ALA:O	1:A:1458:LEU:HG	2.11	0.51
1:A:3512:VAL:HA	1:A:3515:GLN:HG3	1.92	0.51
1:A:4016:PHE:CE1	1:A:4020:MET:HE3	2.45	0.51
1:A:391:ARG:HD3	1:A:394:GLN:NE2	2.25	0.51
1:A:3641:ASP:OD1	1:A:3641:ASP:N	2.41	0.51
1:A:759:GLY:HA3	1:A:766:ALA:HB2	1.93	0.51
1:A:1086:TYR:CE2	1:A:1087:ARG:HG3	2.46	0.51
1:A:1219:PHE:HA	1:A:1222:ASN:HD21	1.75	0.51
1:A:1933:LEU:HD12	1:A:1933:LEU:O	2.11	0.51
1:A:2404:ARG:O	1:A:2408:MET:N	2.42	0.51
1:A:4114:PRO:HA	1:A:4117:LEU:HB2	1.93	0.51
1:A:202:GLY:O	1:A:206:THR:HG23	2.11	0.51
1:A:573:LEU:HD21	1:A:649:PHE:HD1	1.74	0.51
1:A:656:GLN:OE1	1:A:659:ARG:NH1	2.44	0.51
1:A:1739:TYR:CD2	1:A:1743:MET:HE1	2.46	0.51
1:A:2485:ARG:NH2	1:A:2530:ARG:HA	2.26	0.51
1:A:2801:ASP:HB3	1:A:2804:ILE:HB	1.91	0.51
1:A:3008:TRP:HB2	1:A:3051:LEU:HG	1.92	0.51
1:A:3835:PRO:HA	1:A:3838:GLU:HB2	1.93	0.51
1:A:1705:GLY:HA2	1:A:1708:GLU:OE2	2.11	0.51
1:A:2183:HIS:CG	1:A:2185:MET:HE2	2.45	0.51
1:A:3118:ASP:HB3	1:A:3121:LEU:HG	1.93	0.51
1:A:3235:LYS:HA	1:A:3238:MET:SD	2.51	0.51
1:A:3332:THR:O	1:A:3336:ILE:HG12	2.11	0.51
1:A:3593:ARG:O	1:A:3593:ARG:NE	2.44	0.51
1:A:4085:LYS:NZ	1:A:4091:ALA:O	2.43	0.51
1:A:1142:HIS:CE1	1:A:1143:VAL:HG13	2.46	0.51
1:A:1772:HIS:HE1	1:A:1774:MET:HB3	1.74	0.51
1:A:2104:MET:HA	1:A:2107:SER:HB2	1.93	0.51
1:A:450:SER:O	1:A:454:GLN:HG3	2.10	0.51
1:A:966:PHE:HA	1:A:969:LEU:HD13	1.93	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1476:HIS:HD2	1:A:1522:GLY:H	1.58	0.51
1:A:1693:VAL:HA	1:A:1696:LEU:HD23	1.93	0.51
1:A:1850:VAL:HG13	1:A:1851:LEU:HD23	1.93	0.51
1:A:287:LEU:HD11	1:A:337:LYS:HG2	1.93	0.51
1:A:1332:TYR:HB2	1:A:1386:ILE:HD13	1.92	0.51
1:A:1442:GLN:HA	1:A:1445:ARG:HB2	1.93	0.51
1:A:1485:SER:O	1:A:1490:GLY:N	2.44	0.51
1:A:2227:LYS:HB3	1:A:2230:VAL:HG12	1.93	0.51
1:A:2999:LEU:HB3	1:A:3043:TYR:CE2	2.45	0.51
1:A:3811:THR:HG23	1:A:3814:ASP:H	1.74	0.51
1:A:372:PRO:HA	1:A:375:VAL:HG22	1.94	0.50
1:A:1686:LEU:HA	1:A:1689:LYS:HZ2	1.76	0.50
1:A:1690:GLY:O	1:A:1693:VAL:HG12	2.10	0.50
1:A:2411:LEU:HG	1:A:2412:TYR:N	2.26	0.50
1:A:2578:GLU:HG3	1:A:2579:HIS:HD2	1.76	0.50
1:A:3499:ILE:HA	1:A:3502:MET:HE2	1.92	0.50
1:A:1148:ALA:HB2	1:A:1164:CYS:HB2	1.94	0.50
1:A:1225:GLU:OE2	1:A:1235:ILE:N	2.45	0.50
1:A:1568:ASN:HA	1:A:1600:MET:HE1	1.92	0.50
1:A:2364:LEU:HG	1:A:2400:VAL:HG21	1.92	0.50
1:A:3419:PHE:O	1:A:3423:GLN:HG2	2.12	0.50
1:A:738:HIS:HA	1:A:741:ILE:HD12	1.93	0.50
1:A:2159:PRO:HG2	1:A:2160:TYR:CE2	2.46	0.50
1:A:3781:CYS:O	1:A:3785:ALA:N	2.45	0.50
1:A:291:VAL:O	1:A:294:PHE:N	2.44	0.50
1:A:912:PRO:O	1:A:915:THR:OG1	2.26	0.50
1:A:1115:HIS:CG	1:A:1180:GLN:HA	2.47	0.50
1:A:2847:THR:HG23	1:A:2850:PHE:CE1	2.47	0.50
1:A:3063:THR:HA	1:A:3066:ASP:OD2	2.11	0.50
1:A:3859:TYR:HD2	1:A:4077:TYR:CE1	2.30	0.50
1:A:1515:LEU:HG	1:A:1519:PHE:CE2	2.46	0.50
1:A:163:LYS:HZ3	1:A:165:LYS:HB2	1.76	0.50
1:A:187:SER:HA	1:A:190:ILE:HD11	1.94	0.50
1:A:202:GLY:O	1:A:205:LYS:HG3	2.12	0.50
1:A:290:TYR:CZ	1:A:291:VAL:HG13	2.47	0.50
1:A:2231:PHE:CZ	1:A:2272:VAL:HG12	2.46	0.50
1:A:2432:GLN:O	1:A:2436:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:2930:TYR:HA	1:A:2933:ILE:HG22	1.94	0.50
1:A:2950:LYS:O	1:A:2953:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:207:GLN:HE21	1:A:220:LEU:HG	1.77	0.50
1:A:305:ASN:OD1	1:A:306:VAL:N	2.44	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:400:THR:HG23	1:A:401:ASP:H	1.76	0.50
1:A:529:ASP:OD1	1:A:529:ASP:N	2.43	0.50
1:A:705:ALA:O	1:A:709:LYS:HG3	2.11	0.50
1:A:860:GLY:CA	1:A:3136:THR:HG21	2.42	0.50
1:A:869:ASN:O	1:A:872:THR:HG22	2.11	0.50
1:A:1274:ARG:HH22	1:A:1351:THR:HA	1.76	0.50
1:A:1488:TYR:CD2	1:A:1531:LEU:HD11	2.46	0.50
1:A:1846:ASP:HA	1:A:1849:ASP:HB2	1.94	0.50
1:A:3496:ILE:HA	1:A:3499:ILE:HG12	1.93	0.50
2:B:24:DT:H2"	2:B:25:DT:C5	2.46	0.50
1:A:396:PHE:CD1	1:A:410:MET:HE1	2.47	0.50
1:A:1794:GLN:O	1:A:1798:LEU:HG	2.11	0.50
1:A:2148:LYS:HA	1:A:2151:ILE:HG22	1.93	0.50
1:A:2159:PRO:HG2	1:A:2160:TYR:CD2	2.46	0.50
1:A:2452:ARG:HG3	1:A:2498:ILE:HD11	1.94	0.50
1:A:2945:SER:OG	1:A:3977:THR:OG1	2.27	0.50
1:A:1189:GLU:O	1:A:1193:LYS:HG2	2.12	0.50
1:A:3011:LEU:O	1:A:3016:THR:HG22	2.12	0.50
1:A:3100:LYS:O	1:A:3103:ILE:HG22	2.11	0.50
1:A:923:ASP:C	1:A:925:GLN:H	2.20	0.49
1:A:1115:HIS:ND1	1:A:1180:GLN:HA	2.27	0.49
1:A:1218:SER:O	1:A:1222:ASN:ND2	2.45	0.49
1:A:1596:VAL:O	1:A:1600:MET:HG2	2.12	0.49
1:A:2386:LEU:HB3	1:A:2387:PRO:HD3	1.94	0.49
1:A:2987:THR:HG23	1:A:2989:ALA:N	2.27	0.49
1:A:3256:MET:HB3	1:A:3283:LEU:HD21	1.93	0.49
1:A:3767:LEU:O	1:A:3771:MET:HG2	2.12	0.49
1:A:1153:LEU:HD12	1:A:1153:LEU:H	1.77	0.49
1:A:1978:PHE:CG	1:A:1979:GLU:N	2.80	0.49
1:A:2527:HIS:HB3	1:A:2530:ARG:NH1	2.28	0.49
1:A:3229:SER:N	1:A:3232:ARG:HH21	2.10	0.49
1:A:3717:VAL:HA	1:A:3743:HIS:CE1	2.47	0.49
1:A:108:LYS:HE3	1:A:156:PHE:CZ	2.47	0.49
1:A:301:CYS:O	1:A:309:LYS:NZ	2.45	0.49
1:A:538:ASP:HA	1:A:541:MET:HG3	1.95	0.49
1:A:762:TYR:CD2	1:A:764:PRO:HD2	2.47	0.49
1:A:1444:ASP:O	1:A:1447:ARG:HG2	2.12	0.49
1:A:1812:LEU:O	1:A:1815:THR:OG1	2.26	0.49
1:A:2239:LYS:N	1:A:2279:ILE:HD11	2.27	0.49
1:A:2834:GLN:O	1:A:2838:GLN:HG2	2.12	0.49
1:A:3816:LEU:O	1:A:3819:THR:OG1	2.27	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:B:24:DT:H1'	2:B:25:DT:C2	2.47	0.49
1:A:39:GLY:HA2	1:A:42:CYS:HB2	1.94	0.49
1:A:744:ASP:OD1	1:A:744:ASP:N	2.42	0.49
1:A:1568:ASN:OD1	1:A:1603:GLN:HG3	2.12	0.49
1:A:1575:LEU:O	1:A:1579:VAL:HG12	2.12	0.49
1:A:1820:VAL:HG23	1:A:1824:LEU:HB3	1.94	0.49
1:A:3097:ASP:N	1:A:3097:ASP:OD1	2.44	0.49
1:A:1181:THR:HG22	1:A:1184:ARG:HH22	1.77	0.49
1:A:1934:LEU:HD22	1:A:1937:ARG:NH2	2.27	0.49
1:A:2897:LEU:HD21	1:A:2923:TRP:CZ2	2.47	0.49
1:A:3670:MET:O	1:A:3674:SER:N	2.45	0.49
1:A:3737:ARG:HD2	1:A:3805:TRP:CD1	2.48	0.49
1:A:281:GLN:OE1	1:A:281:GLN:N	2.28	0.49
1:A:1255:CYS:SG	1:A:3694:PHE:HB3	2.52	0.49
1:A:1910:GLU:O	1:A:1914:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:2232:ARG:O	1:A:2235:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:3348:LEU:O	1:A:3352:GLU:N	2.42	0.49
1:A:201:LEU:O	1:A:204:LEU:HG	2.13	0.49
1:A:1068:LEU:HD11	1:A:1106:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:2478:MET:O	1:A:2482:ASP:N	2.40	0.49
1:A:3027:LEU:O	1:A:3031:TRP:HB2	2.11	0.49
1:A:3611:GLU:HA	1:A:3614:TYR:HB3	1.94	0.49
1:A:3626:GLY:HA3	1:A:3684:SER:O	2.13	0.49
1:A:1504:ASP:N	1:A:1504:ASP:OD1	2.45	0.49
1:A:1675:TYR:O	1:A:1679:LEU:N	2.36	0.49
1:A:2352:HIS:HD2	1:A:2360:PHE:HB2	1.78	0.49
1:A:3007:GLU:HG2	1:A:3010:SER:HB3	1.94	0.49
1:A:3835:PRO:HB2	1:A:4127:TRP:CE2	2.47	0.49
1:A:3871:PHE:HA	1:A:3874:ARG:HG2	1.95	0.49
1:A:245:SER:O	1:A:248:ILE:HB	2.13	0.49
1:A:363:ILE:HD12	1:A:366:TYR:HB2	1.95	0.49
1:A:394:GLN:HE22	1:A:395:MET:HE3	1.77	0.49
1:A:721:TYR:CD1	1:A:725:LEU:HD23	2.47	0.49
1:A:1983:ASP:OD2	1:A:2185:MET:HE3	2.13	0.49
1:A:2392:VAL:O	1:A:2396:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:2436:LEU:HD21	1:A:2461:PHE:CE2	2.47	0.49
1:A:3771:MET:HA	1:A:3774:ILE:HD12	1.95	0.49
1:A:27:ALA:HB2	1:A:73:LEU:HD21	1.94	0.49
1:A:1611:GLN:HE22	1:A:1613:HIS:CE1	2.30	0.49
1:A:1771:GLN:H	1:A:1822:ARG:HH12	1.60	0.49
1:A:2105:HIS:NE2	1:A:2155:GLU:OE2	2.45	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2873:PRO:HB2	1:A:2925:GLU:HG3	1.95	0.49
1:A:941:MET:CE	1:A:958:MET:HE1	2.43	0.48
1:A:1724:MET:HA	1:A:1724:MET:HE2	1.95	0.48
1:A:1811:ARG:O	1:A:1815:THR:OG1	2.31	0.48
1:A:2434:VAL:O	1:A:2438:ILE:HG12	2.12	0.48
1:A:3416:LEU:HD21	1:A:3445:LEU:HD21	1.93	0.48
1:A:3475:TYR:N	1:A:3476:PRO:HD3	2.27	0.48
1:A:3502:MET:O	1:A:3505:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:29:LEU:HA	1:A:32:HIS:HB2	1.96	0.48
1:A:108:LYS:NZ	1:A:152:LEU:HG	2.28	0.48
1:A:3059:GLN:HA	1:A:3062:LEU:HG	1.95	0.48
1:A:3327:ASN:HB2	1:A:3388:ALA:HB2	1.94	0.48
1:A:3370:SER:OG	1:A:3371:GLU:OE2	2.30	0.48
1:A:3571:PHE:CE2	1:A:3575:LEU:HD11	2.48	0.48
1:A:3729:MET:HB2	1:A:3735:PRO:HG2	1.95	0.48
1:A:3859:TYR:HA	1:A:4119:ARG:HH21	1.77	0.48
1:A:3951:GLN:HE22	1:A:4066:LEU:HD23	1.79	0.48
1:A:994:TRP:CD2	1:A:2581:LEU:HD13	2.48	0.48
1:A:2165:LEU:HD12	1:A:2166:SER:N	2.28	0.48
1:A:3496:ILE:O	1:A:3499:ILE:HG12	2.14	0.48
1:A:3514:VAL:O	1:A:3517:SER:OG	2.26	0.48
1:A:3625:LEU:HD11	1:A:3633:ILE:HD13	1.94	0.48
1:A:238:MET:HE1	1:A:284:THR:HG23	1.94	0.48
1:A:293:LEU:HA	1:A:296:VAL:HG12	1.95	0.48
1:A:1476:HIS:CD2	1:A:1521:PHE:HB3	2.48	0.48
1:A:1825:LEU:HD23	1:A:1828:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:1932:GLN:H	1:A:1937:ARG:NH2	2.09	0.48
1:A:344:GLN:O	1:A:348:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:624:ILE:O	1:A:627:VAL:N	2.46	0.48
1:A:667:TYR:HB2	1:A:728:SER:HB3	1.95	0.48
1:A:1860:GLU:O	1:A:1862:THR:OG1	2.28	0.48
1:A:3002:TYR:HD2	1:A:3011:LEU:HA	1.78	0.48
1:A:3568:ILE:O	1:A:3572:ILE:HG12	2.14	0.48
1:A:4065:LEU:HD12	1:A:4069:GLU:HB3	1.96	0.48
1:A:254:LYS:HZ2	1:A:272:LEU:HG	1.78	0.48
1:A:381:VAL:O	1:A:384:MET:HB3	2.14	0.48
1:A:584:GLU:OE2	1:A:613:HIS:HB2	2.12	0.48
1:A:1060:PHE:HB3	1:A:1064:TYR:CZ	2.48	0.48
1:A:2378:PHE:O	1:A:2382:VAL:N	2.34	0.48
1:A:2539:LEU:O	1:A:2542:LEU:HB3	2.14	0.48
1:A:2788:SER:O	1:A:2792:THR:HG22	2.13	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3606:ILE:HD11	1:A:3608:LYS:HB3	1.96	0.48
1:A:3701:ILE:HD12	1:A:3717:VAL:HB	1.94	0.48
1:A:607:ASP:HB3	1:A:1023:SER:HB2	1.95	0.48
1:A:1949:ILE:HG13	1:A:2100:LEU:HD12	1.96	0.48
1:A:2799:GLN:HG3	1:A:2800:ARG:NE	2.28	0.48
1:A:3029:LYS:H	1:A:3032:SER:HB2	1.79	0.48
1:A:3442:TYR:O	1:A:3446:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:3588:TRP:NE1	1:A:3609:MET:O	2.47	0.48
1:A:3698:GLU:CD	1:A:3698:GLU:H	2.22	0.48
1:A:3844:THR:HA	1:A:3847:SER:O	2.13	0.48
3:C:29:DA:C4	3:C:30:DA:N7	2.81	0.48
1:A:352:VAL:HG11	1:A:1735:ARG:HD3	1.95	0.48
1:A:1248:PHE:HB3	1:A:1320:ASN:HA	1.95	0.48
1:A:1685:ASP:O	1:A:1689:LYS:HG2	2.14	0.48
1:A:2183:HIS:ND1	1:A:2185:MET:HE2	2.29	0.48
1:A:2493:ASN:C	1:A:2496:GLN:HE21	2.20	0.48
1:A:2886:GLN:O	1:A:2889:GLY:N	2.47	0.48
1:A:3588:TRP:HE1	1:A:3609:MET:C	2.21	0.48
1:A:82:ARG:O	1:A:86:LEU:HD23	2.14	0.48
1:A:586:GLN:N	1:A:611:ASN:O	2.31	0.48
1:A:2525:TRP:HA	1:A:2530:ARG:HD2	1.96	0.48
1:A:2801:ASP:OD1	1:A:2803:ILE:N	2.47	0.48
1:A:3369:ASP:HB3	1:A:3372:LYS:HE2	1.96	0.48
1:A:31:GLY:HA2	1:A:34:LEU:HD23	1.96	0.48
1:A:335:LYS:O	1:A:338:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:1334:LYS:O	1:A:1338:VAL:HG23	2.14	0.48
1:A:1696:LEU:HD11	1:A:1710:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:1871:MET:O	1:A:1875:LYS:HG2	2.14	0.48
1:A:2473:MET:HA	1:A:2476:ILE:HD12	1.96	0.48
1:A:2821:ASP:HA	1:A:2829:LYS:HE3	1.96	0.48
1:A:3571:PHE:O	1:A:3575:LEU:HG	2.14	0.48
1:A:3770:VAL:HG11	1:A:4001:THR:HG21	1.96	0.48
1:A:1274:ARG:HH12	1:A:1351:THR:HA	1.79	0.47
1:A:2923:TRP:CE2	1:A:2946:GLU:HG2	2.49	0.47
1:A:3033:GLU:CD	1:A:3034:PRO:HD3	2.38	0.47
1:A:3956:PRO:HB3	1:A:4064:LEU:HD21	1.95	0.47
1:A:4101:GLU:OE1	1:A:4101:GLU:N	2.28	0.47
1:A:225:LYS:HG2	1:A:270:ALA:HB1	1.96	0.47
1:A:717:LYS:HB3	1:A:721:TYR:OH	2.14	0.47
1:A:892:LEU:H	1:A:908:ASP:CG	2.21	0.47
1:A:994:TRP:CZ2	1:A:2581:LEU:HD22	2.49	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1131:ILE:HD13	1:A:1134:LEU:HD12	1.96	0.47
1:A:1133:HIS:N	1:A:1136:ARG:HH21	2.12	0.47
1:A:1264:LEU:HD11	1:A:1341:ILE:HA	1.96	0.47
1:A:1365:ASN:O	1:A:1368:LEU:HB3	2.14	0.47
1:A:2886:GLN:O	1:A:2890:ILE:HD12	2.14	0.47
1:A:3078:LEU:HA	1:A:3082:TYR:HD2	1.80	0.47
1:A:3531:TYR:CD1	1:A:3796:MET:HG3	2.49	0.47
1:A:3589:SER:HA	1:A:3592:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:63:PHE:HZ	1:A:89:LEU:HD23	1.78	0.47
1:A:607:ASP:N	1:A:607:ASP:OD1	2.47	0.47
1:A:1441:ALA:H	1:A:1445:ARG:NH2	2.12	0.47
1:A:1564:SER:O	1:A:1568:ASN:ND2	2.47	0.47
1:A:1622:ILE:O	1:A:1626:TRP:N	2.47	0.47
1:A:2234:ASN:O	1:A:2238:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:2466:SER:O	1:A:2467:THR:HG22	2.14	0.47
1:A:3321:LEU:HD13	1:A:3324:ARG:NH2	2.28	0.47
1:A:131:LEU:HA	1:A:173:LYS:HD3	1.95	0.47
1:A:933:LEU:HD22	1:A:2797:VAL:HG11	1.95	0.47
1:A:1580:LEU:O	1:A:1584:GLN:HG3	2.15	0.47
1:A:2312:TYR:C	1:A:2314:GLU:H	2.22	0.47
1:A:4002:MET:O	1:A:4006:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:469:ALA:HA	1:A:475:LEU:HG	1.97	0.47
1:A:1366:THR:HA	1:A:1369:MET:SD	2.55	0.47
1:A:1623:LEU:HA	1:A:1626:TRP:HB2	1.96	0.47
1:A:2481:HIS:CE1	1:A:2485:ARG:HD2	2.50	0.47
1:A:3421:ASP:OD2	1:A:3467:ARG:HG2	2.13	0.47
1:A:3576:ASP:HB3	1:A:3800:LEU:HD22	1.96	0.47
3:C:32:DA:H1'	3:C:33:DA:C4	2.49	0.47
1:A:293:LEU:O	1:A:297:LEU:HG	2.14	0.47
1:A:887:ASP:OD1	1:A:888:ARG:N	2.48	0.47
1:A:1191:PHE:O	1:A:1195:VAL:HG23	2.14	0.47
1:A:1776:GLU:H	1:A:1776:GLU:CD	2.18	0.47
1:A:3595:GLU:OE1	1:A:3595:GLU:N	2.48	0.47
1:A:3859:TYR:HD1	1:A:4119:ARG:HH21	1.61	0.47
1:A:4027:TRP:CE3	1:A:4030:GLU:HB3	2.50	0.47
1:A:200:PHE:CD2	1:A:224:LEU:HB2	2.49	0.47
1:A:432:THR:OG1	1:A:433:PRO:HD3	2.13	0.47
1:A:784:VAL:O	1:A:787:PRO:HD2	2.14	0.47
1:A:785:MET:HB3	1:A:789:TYR:CZ	2.50	0.47
1:A:873:VAL:HA	1:A:876:SER:OG	2.14	0.47
1:A:1055:ASN:H	1:A:1058:SER:HG	1.62	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1765:VAL:HA	1:A:1768:ARG:HH21	1.80	0.47
1:A:1802:TYR:CZ	1:A:1806:ARG:HD2	2.50	0.47
1:A:1833:LEU:HA	1:A:1836:LEU:HD13	1.96	0.47
1:A:2093:CYS:HA	1:A:2096:PRO:HG2	1.96	0.47
1:A:2142:ILE:HD12	1:A:2142:ILE:H	1.80	0.47
1:A:2215:LEU:O	1:A:2219:LEU:HD23	2.14	0.47
1:A:3647:GLY:O	1:A:3651:LEU:N	2.48	0.47
1:A:3853:GLY:O	1:A:3856:MET:HB3	2.15	0.47
1:A:3962:ARG:HG3	1:A:4124:TRP:CH2	2.49	0.47
1:A:801:LYS:O	1:A:3115:SER:HB3	2.15	0.47
1:A:958:MET:HE3	1:A:961:LEU:HB2	1.96	0.47
1:A:1203:SER:OG	1:A:1205:ASN:HB2	2.15	0.47
1:A:1707:LEU:HD23	1:A:1757:MET:HG2	1.97	0.47
1:A:1770:GLN:NE2	1:A:1771:GLN:HG2	2.30	0.47
1:A:1820:VAL:HG23	1:A:1824:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:2571:ASP:OD1	1:A:2571:ASP:N	2.48	0.47
1:A:3596:LEU:HD13	1:A:3599:THR:O	2.15	0.47
1:A:3807:GLU:O	1:A:3809:THR:HG23	2.14	0.47
2:B:29:DG:H2"	2:B:30:DT:C6	2.50	0.47
1:A:581:LEU:HD22	1:A:620:PHE:CE1	2.50	0.47
1:A:1121:LEU:C	1:A:1123:THR:H	2.23	0.47
1:A:1399:CYS:O	1:A:1403:MET:HG2	2.14	0.47
1:A:1818:SER:HA	1:A:1821:ASP:HB2	1.96	0.47
1:A:3445:LEU:O	1:A:3449:LYS:HG2	2.15	0.47
1:A:3749:PRO:HB2	1:A:3805:TRP:HB3	1.96	0.47
1:A:740:ILE:HD12	1:A:740:ILE:H	1.79	0.47
1:A:1864:ASP:HA	1:A:1867:ILE:HG12	1.96	0.47
1:A:3410:ILE:HD12	1:A:3410:ILE:H	1.80	0.47
1:A:3655:LYS:C	1:A:3657:SER:H	2.23	0.47
1:A:169:THR:HG22	1:A:170:VAL:N	2.27	0.46
1:A:474:VAL:O	1:A:478:CYS:HB2	2.15	0.46
1:A:2316:TYR:HE2	1:A:2359:LYS:HD2	1.81	0.46
1:A:2796:ALA:O	1:A:2799:GLN:HG2	2.15	0.46
1:A:3321:LEU:HD22	1:A:3324:ARG:HH12	1.80	0.46
1:A:3918:LEU:HD22	1:A:3946:PHE:HE1	1.81	0.46
1:A:3981:TYR:HB2	1:A:4108:MET:HE1	1.97	0.46
1:A:1147:LYS:O	1:A:1151:ARG:NH2	2.43	0.46
1:A:1585:SER:O	1:A:1585:SER:OG	2.30	0.46
1:A:2239:LYS:HA	1:A:2242:VAL:HG12	1.96	0.46
1:A:3170:ASP:CG	1:A:3172:LYS:H	2.24	0.46
1:A:3698:GLU:HG3	1:A:3718:ARG:HD2	1.96	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3859:TYR:OH	1:A:4119:ARG:O	2.28	0.46
1:A:3869:THR:O	1:A:3873:LYS:HG2	2.15	0.46
1:A:3971:MET:HB3	1:A:3974:MET:O	2.14	0.46
1:A:4018:GLN:HG3	1:A:4022:LYS:HZ1	1.80	0.46
1:A:642:PHE:CE2	1:A:646:VAL:HG22	2.50	0.46
1:A:2125:TRP:CZ3	1:A:2126:MET:HB3	2.51	0.46
1:A:3278:GLN:NE2	1:A:3326:GLN:OE1	2.33	0.46
1:A:207:GLN:NE2	1:A:220:LEU:HG	2.31	0.46
1:A:565:TYR:OH	1:A:642:PHE:HB2	2.16	0.46
1:A:941:MET:HE1	1:A:962:TYR:HE1	1.80	0.46
1:A:1101:PHE:HD1	1:A:1168:LEU:HD22	1.80	0.46
1:A:1873:TYR:O	1:A:1877:LEU:HG	2.15	0.46
1:A:3067:LYS:O	1:A:3070:HIS:HB3	2.15	0.46
1:A:3177:ASN:OD1	1:A:3178:ILE:N	2.48	0.46
1:A:3417:ALA:HA	1:A:3420:CYS:SG	2.55	0.46
1:A:3467:ARG:HA	1:A:3470:GLN:HE21	1.81	0.46
1:A:3515:GLN:HB3	1:A:3554:PHE:CE2	2.51	0.46
1:A:933:LEU:O	1:A:937:MET:HG2	2.15	0.46
1:A:3859:TYR:HE1	1:A:4119:ARG:HE	1.61	0.46
1:A:450:SER:HB3	1:A:453:MET:SD	2.55	0.46
1:A:1042:LYS:HZ1	1:A:1043:GLN:HG2	1.81	0.46
1:A:2214:ARG:CZ	1:A:2214:ARG:HA	2.45	0.46
1:A:2281:MET:HE1	1:A:2287:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:3014:CYS:O	1:A:3015:SER:OG	2.32	0.46
1:A:3537:SER:HA	1:A:3540:TYR:CE2	2.51	0.46
1:A:3929:MET:HA	1:A:3929:MET:HE2	1.97	0.46
1:A:35:ILE:HG13	1:A:36:ARG:N	2.30	0.46
1:A:574:LYS:HA	1:A:577:GLU:CD	2.41	0.46
1:A:584:GLU:HG3	1:A:613:HIS:O	2.16	0.46
1:A:1589:ASN:HD21	1:A:1592:MET:CG	2.28	0.46
1:A:1686:LEU:HD12	1:A:1689:LYS:HZ2	1.80	0.46
1:A:1850:VAL:HG11	1:A:1873:TYR:CE1	2.50	0.46
1:A:1933:LEU:H	1:A:1937:ARG:HH12	1.63	0.46
1:A:2348:GLN:HA	1:A:2351:GLN:HG2	1.97	0.46
1:A:3359:ILE:O	1:A:3362:LEU:HB3	2.16	0.46
1:A:4101:GLU:H	1:A:4101:GLU:CD	2.17	0.46
1:A:1470:SER:HB2	1:A:1476:HIS:HA	1.97	0.46
1:A:1663:THR:H	1:A:1665:HIS:CE1	2.34	0.46
1:A:1690:GLY:HA2	1:A:1693:VAL:HG12	1.98	0.46
1:A:2397:CYS:O	1:A:2400:VAL:HG12	2.15	0.46
1:A:3766:GLN:O	1:A:3769:GLN:HG2	2.16	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3794:VAL:O	1:A:3802:LEU:N	2.41	0.46
1:A:3812:LEU:HD23	1:A:3925:LEU:HD22	1.98	0.46
1:A:705:ALA:C	1:A:709:LYS:HZ2	2.24	0.46
1:A:1115:HIS:NE2	1:A:1181:THR:HG23	2.31	0.46
1:A:1795:VAL:HG23	1:A:1839:PHE:HB2	1.98	0.46
1:A:2183:HIS:CE1	1:A:2186:VAL:HG23	2.49	0.46
1:A:3924:HIS:ND1	1:A:3927:ASN:OD1	2.43	0.46
1:A:241:ASP:N	1:A:242:PRO:HD3	2.30	0.46
1:A:682:TYR:CZ	1:A:700:LYS:HG2	2.51	0.46
1:A:1618:LEU:O	1:A:1621:THR:OG1	2.32	0.46
1:A:2322:VAL:O	1:A:2326:ILE:HG12	2.15	0.46
1:A:2919:ASP:HA	1:A:2922:ARG:HB2	1.98	0.46
1:A:2962:ARG:HD2	1:A:3989:ARG:HH12	1.81	0.46
1:A:4058:VAL:HG21	1:A:4095:GLU:HB3	1.98	0.46
1:A:853:ILE:HG22	1:A:857:GLN:NE2	2.27	0.45
1:A:868:LYS:HE2	1:A:3173:MET:HG3	1.97	0.45
1:A:1638:PRO:HB2	1:A:1640:GLU:OE2	2.16	0.45
1:A:2094:MET:HG3	1:A:2095:ALA:N	2.32	0.45
1:A:2122:LEU:HB2	1:A:2126:MET:HE3	1.97	0.45
1:A:2158:ARG:C	1:A:2160:TYR:H	2.24	0.45
1:A:2390:HIS:HA	1:A:2394:LYS:HG3	1.98	0.45
1:A:3595:GLU:HG3	1:A:3602:ASN:HB3	1.98	0.45
1:A:67:VAL:HA	1:A:70:ARG:HG2	1.97	0.45
1:A:293:LEU:HD12	1:A:294:PHE:N	2.30	0.45
1:A:1442:GLN:OE1	1:A:1442:GLN:N	2.47	0.45
1:A:2825:THR:HG22	1:A:2828:GLU:CD	2.41	0.45
1:A:3136:THR:O	1:A:3140:GLU:HG2	2.16	0.45
1:A:849:GLU:O	1:A:853:ILE:HG13	2.16	0.45
1:A:1328:GLU:HA	1:A:1331:ASN:ND2	2.31	0.45
1:A:1497:ARG:HA	1:A:1541:ALA:H	1.81	0.45
1:A:1633:TRP:HB2	1:A:1678:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:1748:ASP:O	1:A:1751:GLU:HG2	2.15	0.45
1:A:1764:GLU:O	1:A:1768:ARG:NH2	2.50	0.45
1:A:1781:SER:HA	1:A:1784:ARG:HG2	1.99	0.45
1:A:1971:PRO:HB2	1:A:1975:LEU:HD23	1.97	0.45
1:A:2563:LEU:HD12	1:A:2791:ILE:HG23	1.99	0.45
1:A:3592:VAL:HG12	1:A:3609:MET:HG3	1.99	0.45
1:A:385:TYR:O	1:A:389:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:1275:THR:HG23	1:A:1276:VAL:HG23	1.99	0.45
1:A:2343:GLU:OE1	1:A:2344:LEU:HD22	2.16	0.45
1:A:2870:SER:O	1:A:2870:SER:OG	2.30	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2959:ALA:O	1:A:2963:SER:N	2.49	0.45
1:A:3374:ILE:HG13	1:A:3375:ALA:H	1.81	0.45
1:A:3965:ARG:HG2	1:A:3969:ASN:HD21	1.80	0.45
1:A:291:VAL:HG23	1:A:292:SER:N	2.31	0.45
1:A:1379:PRO:O	1:A:1382:ILE:HG12	2.16	0.45
1:A:1731:PRO:HA	1:A:1736:PHE:CE2	2.52	0.45
1:A:1770:GLN:CD	1:A:1771:GLN:HG2	2.41	0.45
1:A:1863:PHE:HA	1:A:1866:GLN:HB3	1.98	0.45
1:A:2578:GLU:HG3	1:A:2579:HIS:CD2	2.51	0.45
1:A:3271:ASP:O	1:A:3274:VAL:HG22	2.17	0.45
1:A:486:GLY:O	1:A:490:ILE:HG23	2.17	0.45
1:A:1247:PRO:HD2	1:A:1250:LEU:HD13	1.99	0.45
1:A:1377:CYS:SG	1:A:1378:GLU:N	2.89	0.45
1:A:1580:LEU:HD13	1:A:1625:HIS:HE1	1.80	0.45
1:A:2787:HIS:O	1:A:2791:ILE:N	2.39	0.45
1:A:3602:ASN:HA	1:A:3605:ASN:HD21	1.82	0.45
1:A:3879:PRO:HB2	1:A:3882:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:4015:ASN:O	1:A:4018:GLN:HG2	2.17	0.45
1:A:108:LYS:HE3	1:A:156:PHE:HZ	1.82	0.45
1:A:583:LEU:HD21	1:A:620:PHE:HZ	1.82	0.45
1:A:1718:ILE:HG13	1:A:1719:VAL:N	2.32	0.45
1:A:3262:LEU:HD12	1:A:3265:GLU:HB3	1.98	0.45
1:A:524:TYR:CZ	1:A:628:GLU:HG3	2.52	0.45
1:A:670:LEU:HD12	1:A:673:THR:HG21	1.98	0.45
1:A:682:TYR:OH	1:A:700:LYS:HG2	2.17	0.45
1:A:1980:ASN:HD22	1:A:1982:ILE:HD13	1.82	0.45
1:A:2987:THR:N	1:A:2990:GLU:OE2	2.42	0.45
1:A:3463:LEU:HA	1:A:3498:TRP:HZ2	1.82	0.45
1:A:3827:ALA:O	1:A:3831:ASP:HB2	2.17	0.45
2:B:26:DT:H2"	2:B:27:DT:C6	2.51	0.45
1:A:330:ASN:HB3	1:A:333:MET:CG	2.46	0.45
1:A:1102:GLU:O	1:A:1106:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:1686:LEU:HD12	1:A:1689:LYS:NZ	2.32	0.45
1:A:1772:HIS:CE1	1:A:1774:MET:HB3	2.50	0.45
1:A:2310:VAL:HG12	1:A:2311:ARG:N	2.31	0.45
1:A:2542:LEU:O	1:A:2545:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:3681:LYS:O	1:A:3685:PRO:HD2	2.16	0.45
2:B:25:DT:H2"	2:B:26:DT:N3	2.32	0.45
1:A:157:TYR:O	1:A:160:LEU:HB3	2.17	0.45
1:A:417:VAL:O	1:A:420:VAL:HB	2.17	0.45
1:A:1166:LEU:HD12	1:A:1169:VAL:HB	1.99	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2587:GLN:HG3	1:A:2588:GLU:O	2.17	0.45
1:A:2880:CYS:HB3	1:A:2886:GLN:HA	2.00	0.45
1:A:3607:GLU:N	1:A:3607:GLU:OE1	2.49	0.45
1:A:4089:ILE:HA	1:A:4092:GLN:CD	2.41	0.45
2:B:23:DT:H2"	2:B:24:DT:C5	2.51	0.45
1:A:446:PHE:CG	1:A:530:LEU:HD22	2.52	0.44
1:A:1567:ILE:O	1:A:1571:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:1603:GLN:HG2	1:A:1606:ARG:NH1	2.24	0.44
1:A:1634:ALA:H	1:A:1642:LYS:HZ3	1.64	0.44
1:A:3585:PHE:CD2	1:A:3670:MET:HE1	2.47	0.44
1:A:3835:PRO:N	1:A:3836:PRO:HD2	2.32	0.44
1:A:274:LEU:O	1:A:278:HIS:HB2	2.17	0.44
1:A:1487:VAL:HG12	1:A:1559:PHE:HE1	1.81	0.44
1:A:1708:GLU:HG2	1:A:1712:ARG:HH22	1.82	0.44
1:A:1709:GLU:H	1:A:1709:GLU:CD	2.21	0.44
1:A:2536:LEU:O	1:A:2540:LEU:HG	2.16	0.44
1:A:3288:SER:HB2	1:A:3298:LEU:HD21	1.99	0.44
1:A:3347:CYS:O	1:A:3351:ILE:N	2.35	0.44
1:A:3571:PHE:HE1	1:A:3687:MET:HE1	1.81	0.44
1:A:3844:THR:HB	1:A:3850:HIS:HB3	1.99	0.44
1:A:732:PHE:O	1:A:735:SER:OG	2.30	0.44
1:A:753:GLN:HB3	1:A:757:LYS:NZ	2.32	0.44
1:A:1699:PHE:HB3	1:A:1702:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:2183:HIS:O	1:A:2187:VAL:HG23	2.17	0.44
1:A:3138:ILE:HG12	1:A:3189:PHE:HZ	1.81	0.44
1:A:3252:PHE:CE2	1:A:3287:ARG:HA	2.53	0.44
1:A:3733:ARG:HD3	1:A:3753:LYS:NZ	2.31	0.44
1:A:288:ASP:OD1	1:A:288:ASP:N	2.49	0.44
1:A:871:LEU:HD23	1:A:871:LEU:HA	1.85	0.44
1:A:2929:LEU:HD23	1:A:2929:LEU:HA	1.85	0.44
1:A:243:GLN:HG3	1:A:246:ARG:HH21	1.82	0.44
1:A:487:LEU:HD12	1:A:490:ILE:HD11	2.00	0.44
1:A:2415:LEU:HB3	1:A:2420:PHE:HB2	2.00	0.44
1:A:3048:LYS:HB3	1:A:3061:LEU:HD22	1.99	0.44
1:A:3165:THR:HA	1:A:3168:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:3577:GLN:OE1	1:A:3629:ARG:HG3	2.17	0.44
2:B:28:DA:H2"	2:B:29:DG:C8	2.52	0.44
1:A:178:LEU:HD11	1:A:196:LEU:HD13	1.98	0.44
1:A:244:THR:O	1:A:248:ILE:N	2.51	0.44
1:A:737:PRO:HD2	1:A:740:ILE:HD13	1.98	0.44
1:A:1101:PHE:CE2	1:A:1145:LEU:HD12	2.53	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1711:ARG:NH1	1:A:1757:MET:HB3	2.32	0.44
1:A:1714:LEU:O	1:A:1718:ILE:HG12	2.18	0.44
1:A:2183:HIS:CE1	1:A:2185:MET:HB2	2.52	0.44
1:A:2257:PHE:HA	1:A:2260:PHE:CE1	2.52	0.44
1:A:2387:PRO:HA	1:A:2394:LYS:NZ	2.30	0.44
1:A:2954:GLN:O	1:A:2958:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:303:HIS:NE2	1:A:308:LEU:HD12	2.33	0.44
1:A:1019:ASP:HB2	1:A:1020:PRO:HD3	2.00	0.44
1:A:1361:LYS:HD2	1:A:1361:LYS:HA	1.63	0.44
1:A:1385:ASN:HA	1:A:1388:ASP:OD2	2.18	0.44
1:A:1925:GLU:HB3	1:A:1927:MET:SD	2.57	0.44
1:A:2101:VAL:O	1:A:2105:HIS:HB3	2.18	0.44
1:A:2531:LEU:HD12	1:A:2531:LEU:HA	1.80	0.44
1:A:3079:GLU:O	1:A:3083:SER:OG	2.29	0.44
1:A:3872:ARG:HD3	1:A:3872:ARG:HA	1.75	0.44
1:A:334:HIS:HA	1:A:337:LYS:HE2	2.00	0.44
1:A:432:THR:O	1:A:435:LEU:HG	2.18	0.44
1:A:1092:GLU:OE1	1:A:1094:SER:N	2.51	0.44
1:A:1115:HIS:CD2	1:A:1181:THR:H	2.36	0.44
1:A:1714:LEU:HD12	1:A:1717:LEU:HD23	2.00	0.44
1:A:1859:ASN:OD1	1:A:1860:GLU:N	2.44	0.44
1:A:1937:ARG:O	1:A:1940:TYR:HB3	2.18	0.44
1:A:2175:GLU:CG	1:A:2176:ASN:H	2.31	0.44
1:A:3270:ASP:OD1	1:A:3270:ASP:N	2.49	0.44
1:A:3733:ARG:NH2	1:A:3755:GLY:O	2.51	0.44
1:A:1069:HIS:CD2	1:A:3741:ARG:HE	2.36	0.44
1:A:2825:THR:O	1:A:2829:LYS:HG3	2.18	0.44
1:A:3262:LEU:O	1:A:3266:SER:N	2.50	0.44
1:A:248:ILE:O	1:A:252:VAL:HG13	2.18	0.43
1:A:943:GLY:O	1:A:947:GLN:HG2	2.17	0.43
1:A:1253:THR:O	1:A:1257:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:1496:GLU:O	1:A:1498:GLN:HG2	2.17	0.43
1:A:2210:VAL:O	1:A:2214:ARG:HG2	2.17	0.43
1:A:2273:GLY:O	1:A:2277:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:2372:PRO:HB3	1:A:2403:CYS:HB2	1.99	0.43
1:A:2826:LEU:HA	1:A:2829:LYS:HD2	1.99	0.43
1:A:3625:LEU:HD21	1:A:3630:ARG:HB2	1.99	0.43
1:A:3759:ARG:CZ	1:A:4010:SER:HB3	2.48	0.43
2:B:25:DT:H2"	2:B:26:DT:C2	2.53	0.43
1:A:177:LEU:O	1:A:181:LEU:N	2.50	0.43
1:A:197:PHE:HZ	1:A:246:ARG:HG2	1.83	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:766:ALA:O	1:A:770:LEU:HD23	2.18	0.43
1:A:997:ASN:CG	1:A:999:LYS:H	2.25	0.43
1:A:1127:CYS:O	1:A:1131:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:1504:ASP:O	1:A:1506:SER:N	2.50	0.43
1:A:1676:ILE:HA	1:A:1679:LEU:HB3	2.00	0.43
1:A:1824:LEU:O	1:A:1828:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:1927:MET:HE3	1:A:1941:HIS:CD2	2.53	0.43
1:A:2148:LYS:O	1:A:2151:ILE:HG22	2.18	0.43
1:A:2177:ASN:O	1:A:2183:HIS:NE2	2.51	0.43
1:A:2304:VAL:HA	1:A:2307:MET:HE1	2.00	0.43
1:A:2372:PRO:HB2	1:A:2404:ARG:HH21	1.83	0.43
1:A:2551:GLU:OE2	1:A:2849:SER:OG	2.24	0.43
1:A:2890:ILE:HG23	1:A:2926:LEU:HD11	2.00	0.43
1:A:3374:ILE:HG13	1:A:3375:ALA:N	2.34	0.43
1:A:3468:LEU:O	1:A:3472:ILE:HG23	2.17	0.43
1:A:3526:PRO:C	1:A:3528:ALA:H	2.26	0.43
1:A:1204:PRO:O	1:A:1208:LEU:CB	2.67	0.43
1:A:1342:MET:HE1	1:A:1398:VAL:C	2.43	0.43
1:A:1424:THR:O	1:A:1427:SER:OG	2.31	0.43
1:A:1565:GLU:HA	1:A:1568:ASN:ND2	2.32	0.43
1:A:4019:LYS:HD3	1:A:4020:MET:HE2	1.99	0.43
1:A:250:ASN:OD1	1:A:251:PHE:N	2.51	0.43
1:A:441:MET:O	1:A:445:SER:N	2.51	0.43
1:A:1095:LEU:O	1:A:1099:PHE:HD1	2.01	0.43
1:A:1104:LEU:HD21	1:A:1138:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:1171:TRP:CE3	1:A:1172:LEU:HD23	2.53	0.43
1:A:1746:PHE:O	1:A:1762:MET:HE1	2.18	0.43
1:A:1893:GLU:O	1:A:1895:LYS:N	2.44	0.43
1:A:2214:ARG:NH1	1:A:2214:ARG:HA	2.34	0.43
1:A:3008:TRP:CZ3	1:A:3050:LYS:HG3	2.53	0.43
1:A:3086:LEU:HB3	1:A:3102:TYR:CD2	2.54	0.43
1:A:3166:ASN:C	1:A:3166:ASN:HD22	2.26	0.43
1:A:4100:GLU:O	1:A:4104:VAL:N	2.43	0.43
1:A:104:SER:O	1:A:107:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:575:ILE:O	1:A:579:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:583:LEU:HD21	1:A:620:PHE:CZ	2.53	0.43
1:A:1202:ARG:HB3	1:A:1206:LEU:HB3	2.00	0.43
1:A:2252:PRO:C	1:A:2254:ARG:H	2.26	0.43
1:A:2254:ARG:O	1:A:2257:PHE:HB3	2.18	0.43
1:A:2255:LEU:O	1:A:2259:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:197:PHE:HE1	1:A:228:SER:HB3	1.83	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:391:ARG:O	1:A:395:MET:HG2	2.18	0.43
1:A:651:TYR:CE1	1:A:655:LEU:HD11	2.53	0.43
1:A:1362:ASP:HA	1:A:1365:ASN:HB3	2.00	0.43
1:A:1771:GLN:H	1:A:1822:ARG:NH1	2.15	0.43
1:A:1804:MET:HE1	1:A:1819:PHE:HB3	2.00	0.43
1:A:2514:ASN:HB3	1:A:2517:LEU:HB3	2.00	0.43
1:A:2931:ARG:NH2	1:A:3000:ASP:OD2	2.48	0.43
1:A:3006:ALA:O	1:A:3008:TRP:N	2.51	0.43
1:A:3172:LYS:HG2	1:A:3779:SER:HB3	2.00	0.43
1:A:3256:MET:HB3	1:A:3287:ARG:HH22	1.83	0.43
1:A:3533:PHE:CE2	1:A:3562:LEU:HD21	2.54	0.43
1:A:523:THR:HG23	1:A:525:LYS:H	1.84	0.43
1:A:574:LYS:O	1:A:577:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:3059:GLN:OE1	1:A:3062:LEU:HD21	2.19	0.43
1:A:3259:LEU:HD21	1:A:3280:TYR:HB2	2.01	0.43
1:A:3681:LYS:HB3	1:A:3688:SER:HB3	1.99	0.43
1:A:3833:ARG:HA	1:A:3838:GLU:OE2	2.17	0.43
1:A:4015:ASN:C	1:A:4015:ASN:HD22	2.27	0.43
1:A:4125:GLU:HB3	1:A:4128:MET:SD	2.58	0.43
1:A:1150:LYS:HD2	1:A:1150:LYS:HA	1.89	0.43
1:A:1397:ASP:O	1:A:1401:ASN:ND2	2.51	0.43
1:A:1632:TRP:CD1	1:A:1632:TRP:N	2.87	0.43
1:A:3557:ARG:HB2	1:A:3561:LYS:HZ3	1.84	0.43
1:A:3575:LEU:O	1:A:3578:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:3629:ARG:O	1:A:3633:ILE:HG23	2.19	0.43
2:B:26:DT:H1'	2:B:27:DT:C2	2.54	0.43
1:A:63:PHE:O	1:A:67:VAL:HG13	2.19	0.43
1:A:163:LYS:HD2	1:A:163:LYS:HA	1.72	0.43
1:A:254:LYS:NZ	1:A:272:LEU:HG	2.33	0.43
1:A:531:PHE:O	1:A:535:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:1667:SER:OG	1:A:1670:GLU:HB2	2.19	0.43
1:A:1786:ALA:HB2	1:A:1827:LEU:HD13	2.01	0.43
1:A:2561:PHE:O	1:A:2565:MET:HG2	2.19	0.43
1:A:2877:SER:O	1:A:2881:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:879:MET:SD	1:A:879:MET:N	2.91	0.43
1:A:994:TRP:CZ3	1:A:2581:LEU:HB3	2.54	0.43
1:A:1063:LEU:O	1:A:1067:ALA:N	2.46	0.43
1:A:1101:PHE:CD1	1:A:1168:LEU:HD22	2.54	0.43
1:A:1135:CYS:HB2	1:A:1190:LEU:HD11	2.01	0.43
1:A:1181:THR:HA	1:A:1184:ARG:NH2	2.33	0.43
1:A:1268:ASN:HB2	1:A:1344:PHE:HD1	1.83	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1344:PHE:O	1:A:1348:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:1388:ASP:HB3	1:A:1392:MET:HE2	2.00	0.43
1:A:1729:PHE:HB2	1:A:1736:PHE:HB2	2.01	0.43
1:A:1881:TYR:CE2	1:A:1951:VAL:HG22	2.53	0.43
1:A:1927:MET:C	1:A:1929:GLY:H	2.27	0.43
1:A:2184:TYR:HA	1:A:2187:VAL:HB	2.01	0.43
1:A:2792:THR:N	1:A:2793:PRO:HD2	2.34	0.43
1:A:2933:ILE:HG23	1:A:2935:GLU:OE1	2.18	0.43
1:A:3348:LEU:O	1:A:3352:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:3533:PHE:O	1:A:3537:SER:OG	2.37	0.43
1:A:3569:GLN:HE21	1:A:3573:ASN:CG	2.27	0.43
1:A:153:PHE:HA	1:A:156:PHE:HD2	1.83	0.42
1:A:222:GLY:HA3	1:A:267:VAL:HG22	2.00	0.42
1:A:391:ARG:HA	1:A:394:GLN:HE21	1.83	0.42
1:A:1069:HIS:CG	1:A:1070:PRO:HD2	2.54	0.42
1:A:1090:ARG:HB3	1:A:1091:GLU:OE2	2.19	0.42
1:A:3389:VAL:HG21	1:A:3449:LYS:HE2	2.00	0.42
1:A:3493:TRP:CD1	1:A:3711:PRO:HA	2.54	0.42
1:A:3860:LYS:HA	1:A:4076:ASP:OD2	2.19	0.42
1:A:4065:LEU:HA	1:A:4074:PHE:CE1	2.54	0.42
1:A:390:GLN:HA	1:A:393:LYS:HE2	2.01	0.42
1:A:864:GLY:HA2	1:A:867:ASN:ND2	2.35	0.42
1:A:958:MET:CE	1:A:961:LEU:HB2	2.49	0.42
1:A:1219:PHE:HA	1:A:1222:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:1470:SER:HB2	1:A:1476:HIS:ND1	2.34	0.42
1:A:1959:LEU:H	1:A:2108:LEU:HD12	1.84	0.42
1:A:2313:LYS:HB3	1:A:2359:LYS:HE3	2.01	0.42
1:A:2378:PHE:O	1:A:2382:VAL:HG13	2.19	0.42
1:A:3299:THR:O	1:A:3302:LYS:HG3	2.19	0.42
1:A:3864:ARG:O	1:A:3867:THR:OG1	2.29	0.42
1:A:38:LEU:HD11	1:A:85:ILE:HD12	2.01	0.42
1:A:243:GLN:OE1	1:A:246:ARG:NH2	2.52	0.42
1:A:333:MET:HE2	1:A:334:HIS:CE1	2.54	0.42
1:A:1061:LYS:HA	1:A:1064:TYR:CD2	2.54	0.42
1:A:1718:ILE:O	1:A:1722:PHE:N	2.39	0.42
1:A:1820:VAL:HA	1:A:1824:LEU:HB3	2.00	0.42
1:A:2181:GLY:HA2	1:A:2222:HIS:ND1	2.35	0.42
1:A:2193:ILE:HG23	1:A:2194:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:2379:MET:HA	1:A:2382:VAL:HG22	2.01	0.42
1:A:2493:ASN:O	1:A:2496:GLN:NE2	2.41	0.42
1:A:3922:ASP:C	1:A:3923:ARG:HD2	2.45	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4056:PRO:HG3	1:A:4107:LEU:HG	2.00	0.42
1:A:253:LEU:O	1:A:258:PRO:HG3	2.19	0.42
1:A:977:ASP:OD2	1:A:980:THR:HG23	2.20	0.42
1:A:1249:SER:C	1:A:1251:GLN:HE21	2.28	0.42
1:A:2187:VAL:O	1:A:2190:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:3389:VAL:HG23	1:A:3413:TYR:CE1	2.55	0.42
1:A:3509:ASP:O	1:A:3510:GLN:HG2	2.19	0.42
1:A:3618:GLY:HA2	1:A:3633:ILE:HB	2.02	0.42
1:A:3661:ASP:HA	1:A:3664:ASN:ND2	2.34	0.42
1:A:4064:LEU:HD13	1:A:4077:TYR:HB3	2.01	0.42
1:A:320:LEU:HD12	1:A:369:PHE:CE2	2.50	0.42
1:A:405:ASP:OD1	1:A:405:ASP:N	2.51	0.42
1:A:672:ILE:HG13	1:A:673:THR:N	2.35	0.42
1:A:2183:HIS:ND1	1:A:2185:MET:HB2	2.34	0.42
1:A:2397:CYS:HA	1:A:2400:VAL:HG12	2.01	0.42
1:A:2457:PRO:HA	1:A:2460:GLU:CD	2.45	0.42
1:A:2816:ILE:O	1:A:2820:MET:N	2.52	0.42
1:A:2868:LEU:O	1:A:2871:LEU:HD12	2.19	0.42
1:A:524:TYR:CE1	1:A:525:LYS:HG3	2.54	0.42
1:A:566:ASP:HB3	1:A:570:LYS:NZ	2.33	0.42
1:A:581:LEU:HD22	1:A:620:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:1305:ASP:HB3	1:A:1334:LYS:HZ3	1.84	0.42
1:A:1638:PRO:O	1:A:1641:THR:OG1	2.31	0.42
1:A:1686:LEU:HD21	1:A:1721:HIS:NE2	2.34	0.42
1:A:1708:GLU:OE1	1:A:1708:GLU:N	2.27	0.42
1:A:1756:PRO:HG2	1:A:1757:MET:SD	2.59	0.42
1:A:2950:LYS:HG3	1:A:2952:ILE:H	1.85	0.42
1:A:3252:PHE:HB3	1:A:3287:ARG:HH21	1.84	0.42
1:A:3728:VAL:C	1:A:3729:MET:HE2	2.45	0.42
1:A:3733:ARG:HH21	1:A:3755:GLY:HA3	1.85	0.42
1:A:3945:ALA:H	1:A:3948:SER:CB	2.32	0.42
1:A:165:LYS:HD2	1:A:165:LYS:HA	1.92	0.42
1:A:204:LEU:HA	1:A:207:GLN:CD	2.45	0.42
1:A:1007:VAL:O	1:A:1010:LEU:N	2.52	0.42
1:A:1015:ASP:OD1	1:A:1016:GLY:N	2.53	0.42
1:A:1270:PHE:HB3	1:A:1276:VAL:HG21	2.01	0.42
1:A:1869:LYS:O	1:A:1873:TYR:HD1	2.02	0.42
1:A:2202:PRO:HD2	1:A:2245:TRP:NE1	2.34	0.42
1:A:2358:ASP:O	1:A:2362:VAL:HG23	2.20	0.42
1:A:2394:LYS:O	1:A:2398:LEU:HD23	2.20	0.42
1:A:2443:MET:SD	1:A:2476:ILE:HG23	2.59	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2522:ARG:HG2	1:A:2561:PHE:HE1	1.85	0.42
1:A:2950:LYS:HZ3	1:A:2951:GLN:HE21	1.67	0.42
1:A:3033:GLU:OE1	1:A:3033:GLU:N	2.38	0.42
1:A:3472:ILE:HG23	1:A:3483:MET:CE	2.43	0.42
1:A:3885:ARG:HA	1:A:3888:VAL:HG12	2.02	0.42
1:A:156:PHE:HA	1:A:159:GLU:HG2	2.02	0.42
1:A:459:ARG:NH1	1:A:543:SER:OG	2.49	0.42
1:A:1153:LEU:HD23	1:A:1160:SER:HB2	2.02	0.42
1:A:1832:SER:O	1:A:1834:ASP:N	2.52	0.42
1:A:2101:VAL:O	1:A:2105:HIS:CB	2.68	0.42
1:A:2343:GLU:O	1:A:2347:LYS:HG2	2.19	0.42
1:A:3459:ASN:OD1	1:A:3460:GLU:N	2.51	0.42
1:A:360:SER:O	1:A:364:ARG:HG2	2.20	0.42
1:A:461:ILE:O	1:A:464:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:736:LEU:HA	1:A:736:LEU:HD23	1.87	0.42
1:A:1378:GLU:OE1	1:A:1381:SER:HB2	2.20	0.42
1:A:1855:PHE:O	1:A:1857:LYS:N	2.51	0.42
1:A:1933:LEU:H	1:A:1937:ARG:CZ	2.32	0.42
1:A:2193:ILE:HA	1:A:2196:TRP:CD1	2.55	0.42
1:A:2225:HIS:CG	1:A:2226:PRO:HD2	2.55	0.42
1:A:2384:PHE:O	1:A:2387:PRO:HD2	2.20	0.42
1:A:2451:LEU:O	1:A:2455:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:2971:GLN:HA	1:A:2974:GLU:OE2	2.20	0.42
1:A:3122:HIS:NE2	1:A:3126:LEU:HD11	2.35	0.42
1:A:101:ALA:HB3	1:A:102:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:227:LEU:HD23	1:A:231:LEU:HB2	2.02	0.42
1:A:291:VAL:HG23	1:A:292:SER:H	1.84	0.42
1:A:1380:ALA:C	1:A:1383:GLY:H	2.28	0.42
1:A:1437:TYR:CD1	1:A:1507:CYS:HB3	2.55	0.42
1:A:2891:ARG:HD2	1:A:2891:ARG:HA	1.88	0.42
1:A:3819:THR:HG21	1:A:3886:ALA:HB2	2.02	0.42
1:A:4064:LEU:HD23	1:A:4064:LEU:HA	1.85	0.42
1:A:645:TRP:O	1:A:646:VAL:C	2.63	0.41
1:A:667:TYR:HE2	1:A:725:LEU:HD11	1.84	0.41
1:A:718:MET:HE2	1:A:730:LEU:HD21	2.02	0.41
1:A:1133:HIS:O	1:A:1137:ILE:HG23	2.20	0.41
1:A:1407:LYS:HA	1:A:1412:LYS:HB3	2.02	0.41
1:A:1415:LEU:O	1:A:1419:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:1504:ASP:C	1:A:1506:SER:H	2.28	0.41
1:A:1637:SER:HB3	1:A:1642:LYS:HE2	2.02	0.41
1:A:1637:SER:HB3	1:A:1642:LYS:HZ3	1.85	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2350:LYS:HA	1:A:2350:LYS:HD2	1.88	0.41
1:A:2453:GLU:HA	1:A:2456:ASN:OD1	2.20	0.41
1:A:2576:MET:HE1	1:A:2786:LYS:C	2.44	0.41
1:A:3179:TRP:HB3	1:A:3242:MET:HE2	2.02	0.41
1:A:293:LEU:O	1:A:296:VAL:HG12	2.20	0.41
1:A:753:GLN:O	1:A:757:LYS:HG3	2.20	0.41
1:A:1484:LEU:HD21	1:A:1527:ARG:HH21	1.85	0.41
1:A:1803:GLU:OE1	1:A:1806:ARG:HD3	2.20	0.41
1:A:1947:CYS:O	1:A:1951:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:3319:ASN:O	1:A:3323:PHE:N	2.47	0.41
1:A:3493:TRP:CZ2	1:A:3711:PRO:HG3	2.54	0.41
1:A:3858:MET:HE1	1:A:3859:TYR:CE1	2.54	0.41
1:A:291:VAL:O	1:A:292:SER:C	2.62	0.41
1:A:1638:PRO:HB2	1:A:1640:GLU:OE1	2.19	0.41
1:A:3370:SER:O	1:A:3374:ILE:HG12	2.20	0.41
1:A:3686:TRP:O	1:A:3687:MET:C	2.62	0.41
1:A:3817:LEU:O	1:A:3825:LYS:HD2	2.21	0.41
1:A:4065:LEU:HA	1:A:4074:PHE:HE1	1.85	0.41
1:A:63:PHE:HA	1:A:66:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:134:LEU:HB3	1:A:177:LEU:HD11	2.01	0.41
1:A:568:PHE:HE2	1:A:634:LEU:HD21	1.85	0.41
1:A:1186:LYS:O	1:A:1190:LEU:HD23	2.19	0.41
1:A:1366:THR:HG23	1:A:1367:HIS:N	2.36	0.41
1:A:1613:HIS:CE1	1:A:1614:GLN:HG3	2.56	0.41
1:A:1933:LEU:H	1:A:1937:ARG:NH2	2.19	0.41
1:A:2485:ARG:HH12	1:A:2529:THR:HG22	1.85	0.41
1:A:2492:ASP:C	1:A:2494:ASP:H	2.28	0.41
1:A:2979:GLN:N	1:A:2979:GLN:OE1	2.53	0.41
1:A:2999:LEU:HD22	1:A:3043:TYR:CD2	2.56	0.41
1:A:3119:VAL:HA	1:A:3125:ARG:HD2	2.02	0.41
1:A:3170:ASP:N	1:A:3174:ASP:OD2	2.53	0.41
1:A:3465:PHE:CZ	1:A:3469:LEU:HD21	2.56	0.41
1:A:3700:GLU:HA	1:A:3718:ARG:HA	2.01	0.41
1:A:3871:PHE:CD1	1:A:4118:GLY:HA2	2.55	0.41
1:A:49:ALA:HB3	1:A:52:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:293:LEU:HD11	1:A:319:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:319:PHE:O	1:A:323:VAL:HG23	2.20	0.41
1:A:364:ARG:HA	1:A:364:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:899:ARG:HH21	1:A:2569:SER:N	2.18	0.41
1:A:1625:HIS:HA	1:A:1627:LYS:HZ3	1.86	0.41
1:A:2140:LEU:HD12	1:A:2140:LEU:HA	1.75	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2372:PRO:O	1:A:2374:LEU:N	2.54	0.41
1:A:2481:HIS:CD2	1:A:2499:PHE:HE1	2.39	0.41
1:A:2987:THR:HG22	1:A:2990:GLU:HG2	2.02	0.41
1:A:3559:LYS:HA	1:A:3562:LEU:HG	2.03	0.41
1:A:153:PHE:HA	1:A:156:PHE:CD2	2.55	0.41
1:A:1049:GLN:HE21	1:A:1056:THR:N	2.18	0.41
1:A:1153:LEU:HA	1:A:1154:PRO:HD3	1.92	0.41
1:A:1824:LEU:HD11	1:A:1828:LEU:HD21	2.01	0.41
1:A:2478:MET:SD	1:A:2479:TRP:N	2.93	0.41
1:A:2533:SER:HA	1:A:2538:ARG:NH2	2.36	0.41
1:A:3068:ALA:O	1:A:3075:LYS:HB3	2.21	0.41
1:A:3169:PRO:HD2	1:A:3179:TRP:CZ3	2.55	0.41
1:A:3521:ILE:HD11	1:A:3525:TYR:HB2	2.02	0.41
1:A:47:SER:H	1:A:96:MET:HE2	1.86	0.41
1:A:131:LEU:O	1:A:135:LEU:HD23	2.20	0.41
1:A:416:SER:O	1:A:420:VAL:HG23	2.21	0.41
1:A:616:LYS:O	1:A:619:ASP:HB2	2.20	0.41
1:A:1217:VAL:O	1:A:1221:ILE:HG22	2.20	0.41
1:A:1470:SER:CB	1:A:1476:HIS:HA	2.51	0.41
1:A:1686:LEU:HD11	1:A:1721:HIS:CD2	2.55	0.41
1:A:1747:LEU:HD22	1:A:1778:PHE:HD1	1.86	0.41
1:A:1774:MET:O	1:A:1774:MET:HG3	2.21	0.41
1:A:2167:PRO:O	1:A:2170:GLN:HB3	2.20	0.41
1:A:3257:LYS:C	1:A:3257:LYS:HD2	2.45	0.41
1:A:3588:TRP:CZ2	1:A:3592:VAL:HG11	2.55	0.41
1:A:3606:ILE:HG23	1:A:3609:MET:HE1	2.01	0.41
1:A:3633:ILE:HG13	1:A:3634:GLN:N	2.35	0.41
1:A:242:PRO:HB2	1:A:246:ARG:NH1	2.33	0.41
1:A:269:SER:HB3	1:A:308:LEU:HD22	2.03	0.41
1:A:270:ALA:O	1:A:273:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:409:GLN:N	1:A:409:GLN:OE1	2.53	0.41
1:A:1039:TRP:HA	1:A:1042:LYS:HE3	2.02	0.41
1:A:1100:VAL:HG13	1:A:1101:PHE:N	2.36	0.41
1:A:2587:GLN:HG2	1:A:2777:HIS:O	2.20	0.41
1:A:2860:ASP:O	1:A:2864:GLN:NE2	2.54	0.41
1:A:2971:GLN:O	1:A:2974:GLU:HG2	2.21	0.41
1:A:3576:ASP:OD1	1:A:3577:GLN:N	2.54	0.41
1:A:3778:ASP:OD1	1:A:3780:ALA:N	2.51	0.41
1:A:131:LEU:HA	1:A:173:LYS:CE	2.51	0.41
1:A:280:SER:O	1:A:283:SER:OG	2.37	0.41
1:A:291:VAL:HG12	1:A:340:TYR:CE2	2.56	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:418:ALA:O	1:A:422:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:847:SER:O	1:A:851:ILE:N	2.41	0.41
1:A:1112:ALA:HB1	1:A:1180:GLN:HG2	2.03	0.41
1:A:1115:HIS:CE1	1:A:1180:GLN:HA	2.55	0.41
1:A:1723:PRO:HG3	1:A:1729:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:1729:PHE:CB	1:A:1736:PHE:HB2	2.51	0.41
1:A:1776:GLU:HG2	1:A:1777:LEU:H	1.85	0.41
1:A:2126:MET:HE1	1:A:2160:TYR:CG	2.56	0.41
1:A:2363:CYS:O	1:A:2367:VAL:HG12	2.21	0.41
1:A:2368:THR:HA	1:A:2371:PHE:O	2.20	0.41
1:A:3341:LEU:HD11	1:A:3346:ALA:HB2	2.03	0.41
1:A:3800:LEU:HD12	1:A:3800:LEU:HA	1.86	0.41
1:A:165:LYS:HB3	1:A:167:PRO:HD2	2.03	0.41
1:A:864:GLY:HA2	1:A:867:ASN:HD21	1.84	0.41
1:A:1156:GLY:O	1:A:1171:TRP:NE1	2.54	0.41
1:A:1171:TRP:HE3	1:A:1172:LEU:HD23	1.86	0.41
1:A:1179:PRO:HB3	1:A:1259:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:1298:LEU:HD23	1:A:1298:LEU:HA	1.91	0.41
1:A:1638:PRO:HB2	1:A:1640:GLU:CD	2.46	0.41
1:A:1750:LEU:HD13	1:A:1758:LEU:HB2	2.04	0.41
1:A:1754:GLN:HE22	1:A:1788:ARG:C	2.29	0.41
1:A:1825:LEU:H	1:A:1825:LEU:HG	1.72	0.41
1:A:1835:ALA:HA	1:A:1838:GLU:OE2	2.20	0.41
1:A:1981:LEU:O	1:A:1981:LEU:HD23	2.21	0.41
1:A:2402:LEU:O	1:A:2405:VAL:HG12	2.21	0.41
1:A:3010:SER:HA	1:A:3013:TYR:CE2	2.56	0.41
1:A:3066:ASP:OD1	1:A:3067:LYS:N	2.54	0.41
1:A:3237:SER:O	1:A:3240:MET:HG3	2.21	0.41
1:A:3245:SER:HA	1:A:3248:LYS:HE3	2.03	0.41
1:A:3330:LEU:HD23	1:A:3384:HIS:CE1	2.56	0.41
1:A:3558:ILE:HG22	1:A:3562:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:3565:GLY:C	1:A:3567:VAL:H	2.28	0.41
1:A:68:PHE:CE1	1:A:110:THR:HG22	2.56	0.40
1:A:395:MET:CE	1:A:1738:ASN:HD21	2.34	0.40
1:A:411:PRO:O	1:A:414:LEU:HG	2.20	0.40
1:A:1251:GLN:HB3	1:A:1254:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1301:ILE:HG13	1:A:1302:ALA:N	2.35	0.40
1:A:1342:MET:O	1:A:1345:THR:OG1	2.34	0.40
1:A:1699:PHE:O	1:A:1702:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:2265:PRO:HG2	1:A:2269:ASP:OD2	2.21	0.40
1:A:2481:HIS:ND1	1:A:2481:HIS:O	2.54	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3234:CYS:O	1:A:3237:SER:HB3	2.21	0.40
1:A:3321:LEU:HA	1:A:3324:ARG:NH2	2.36	0.40
1:A:3329:LEU:O	1:A:3332:THR:OG1	2.35	0.40
1:A:220:LEU:H	1:A:220:LEU:HD23	1.86	0.40
1:A:246:ARG:HA	1:A:249:PHE:CD2	2.56	0.40
1:A:352:VAL:HG21	1:A:1735:ARG:CZ	2.50	0.40
1:A:1181:THR:HA	1:A:1184:ARG:CZ	2.50	0.40
1:A:1345:THR:O	1:A:1348:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:1463:LEU:HD23	1:A:1463:LEU:H	1.86	0.40
1:A:2085:MET:O	1:A:2089:ASN:HB3	2.21	0.40
1:A:2531:LEU:HG	1:A:2538:ARG:HG3	2.03	0.40
1:A:2829:LYS:HA	1:A:2832:ILE:HG22	2.03	0.40
1:A:3078:LEU:HA	1:A:3082:TYR:CD2	2.56	0.40
1:A:3519:GLU:O	1:A:3522:THR:OG1	2.37	0.40
1:A:3664:ASN:OD1	1:A:3665:MET:N	2.54	0.40
1:A:3737:ARG:HD2	1:A:3805:TRP:CG	2.56	0.40
1:A:65:LEU:O	1:A:69:VAL:HG23	2.22	0.40
1:A:891:ARG:H	1:A:908:ASP:CG	2.28	0.40
1:A:1069:HIS:HD2	1:A:3741:ARG:HH21	1.70	0.40
1:A:1104:LEU:HD22	1:A:1134:LEU:HD13	2.02	0.40
1:A:1558:TYR:CZ	1:A:1562:LEU:HD11	2.56	0.40
1:A:1686:LEU:HD11	1:A:1721:HIS:NE2	2.35	0.40
1:A:2094:MET:HG3	1:A:2095:ALA:H	1.86	0.40
1:A:2339:GLU:HG2	1:A:2340:SER:N	2.36	0.40
1:A:2514:ASN:CG	1:A:2517:LEU:H	2.29	0.40
1:A:2554:PHE:C	1:A:2556:SER:H	2.28	0.40
1:A:2940:ARG:NH2	1:A:2960:GLU:HB3	2.37	0.40
1:A:3381:ALA:O	1:A:3385:LEU:HD23	2.21	0.40
1:A:3718:ARG:HE	1:A:3718:ARG:HB2	1.69	0.40
1:A:3753:LYS:HB3	1:A:3753:LYS:HE3	1.90	0.40
1:A:3864:ARG:O	1:A:3868:VAL:HG23	2.22	0.40
1:A:872:THR:O	1:A:876:SER:N	2.54	0.40
1:A:972:LEU:HB3	1:A:984:TYR:CE2	2.57	0.40
1:A:1072:ALA:HA	1:A:1075:ARG:CZ	2.52	0.40
1:A:1739:TYR:CE2	1:A:1743:MET:HE1	2.56	0.40
1:A:2091:HIS:O	1:A:2094:MET:HE3	2.21	0.40
1:A:2105:HIS:CE1	1:A:2156:VAL:HA	2.57	0.40
1:A:2207:LYS:HA	1:A:2210:VAL:HB	2.04	0.40
1:A:2300:PHE:HA	1:A:2303:LEU:HB3	2.04	0.40
1:A:2440:TYR:HA	1:A:2443:MET:SD	2.61	0.40
1:A:2448:PRO:HA	1:A:2451:LEU:HB3	2.03	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2868:LEU:C	1:A:2870:SER:H	2.29	0.40
1:A:3793:VAL:HG22	1:A:3803:ILE:HG22	2.02	0.40
1:A:4086:ASP:OD1	1:A:4087:HIS:N	2.51	0.40
1:A:400:THR:HG23	1:A:401:ASP:N	2.36	0.40
1:A:650:SER:O	1:A:653:LEU:HB2	2.21	0.40
1:A:1014:LEU:HD22	1:A:1029:CYS:SG	2.62	0.40
1:A:1390:GLN:HA	1:A:1393:ALA:HB3	2.04	0.40
1:A:1452:VAL:HG11	1:A:1514:LEU:HD23	2.04	0.40
1:A:1845:VAL:O	1:A:1848:ILE:HG12	2.21	0.40
1:A:2100:LEU:O	1:A:2104:MET:HG3	2.21	0.40
1:A:2205:VAL:HG12	1:A:2207:LYS:N	2.33	0.40
1:A:2366:LYS:HD3	1:A:2366:LYS:HA	1.95	0.40
1:A:3013:TYR:O	1:A:3017:ALA:HB3	2.22	0.40
1:A:3046:ARG:HH22	1:A:3177:ASN:HB2	1.87	0.40
1:A:3325:ASP:HA	1:A:3328:ILE:HG22	2.04	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	3634/4156 (87%)	3246 (89%)	387 (11%)	1 (0%)	100 100

All (1) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1895	LYS

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	3172/3671 (86%)	3171 (100%)	1 (0%)	100	100

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

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3483	MET

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (33) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	16	GLN
1	A	394	GLN
1	A	485	GLN
1	A	739	ASN
1	A	998	ASN
1	A	1004	GLN
1	A	1049	GLN
1	A	1125	GLN
1	A	1231	GLN
1	A	1401	ASN
1	A	1418	HIS
1	A	1459	HIS
1	A	1465	HIS
1	A	1509	GLN
1	A	1534	ASN
1	A	1589	ASN
1	A	1598	ASN
1	A	1738	ASN
1	A	2348	GLN
1	A	2352	HIS
1	A	2784	GLN
1	A	2807	GLN
1	A	2859	GLN
1	A	2951	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2954	GLN
1	A	3003	ASN
1	A	3430	ASN
1	A	3494	GLN
1	A	3569	GLN
1	A	3573	ASN
1	A	3643	HIS
1	A	3772	ASN
1	A	4015	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	2

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	4128:MET	C	5011:UNK	N	92.87
1	A	5016:UNK	C	6004:UNK	N	47.75

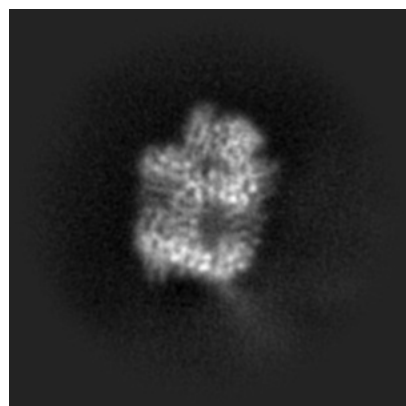
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-11216. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

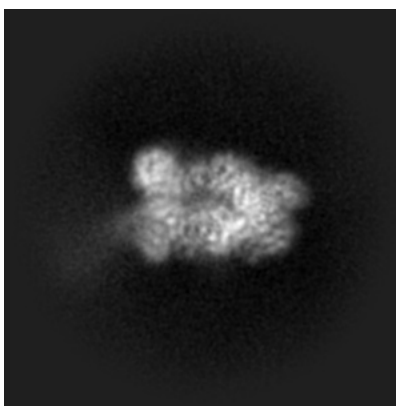
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

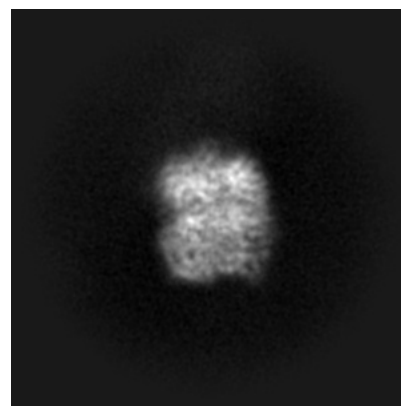
6.1.1 Primary map



X

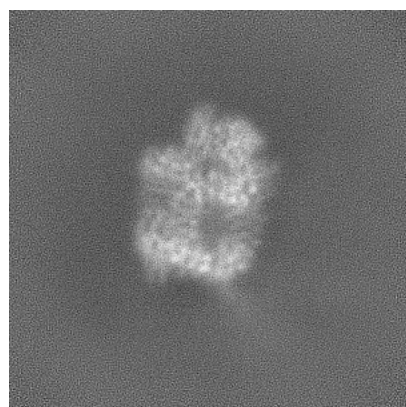


Y

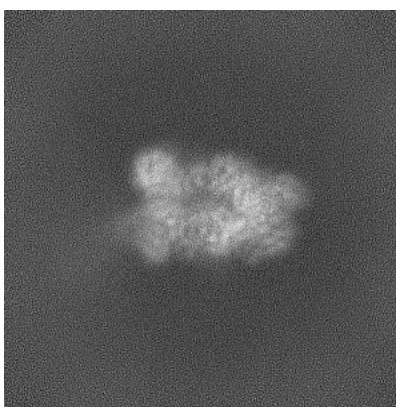


Z

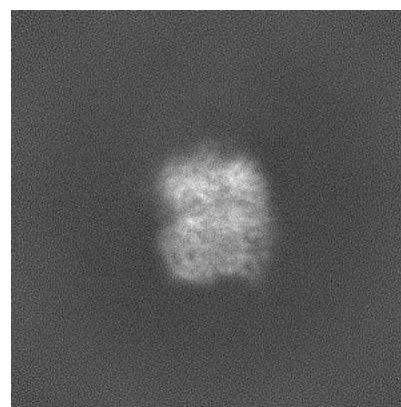
6.1.2 Raw map



X



Y

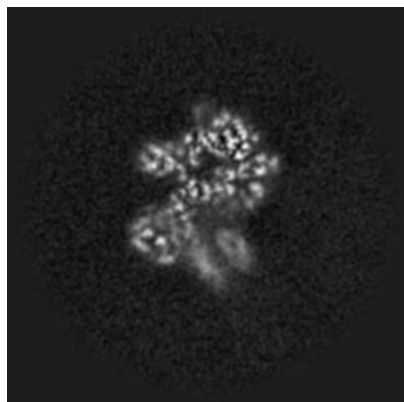


Z

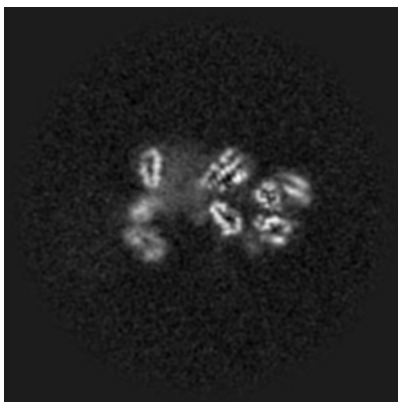
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

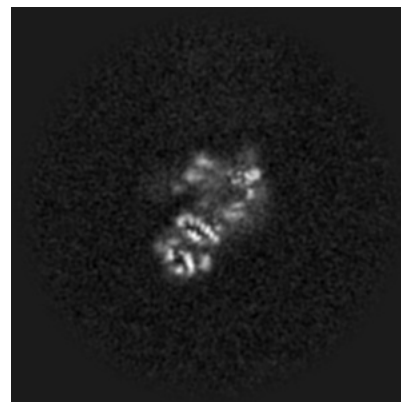
6.2.1 Primary map



X Index: 170

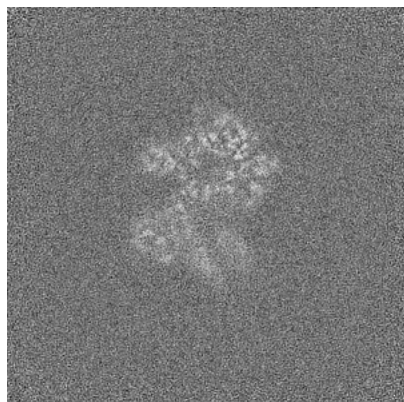


Y Index: 170

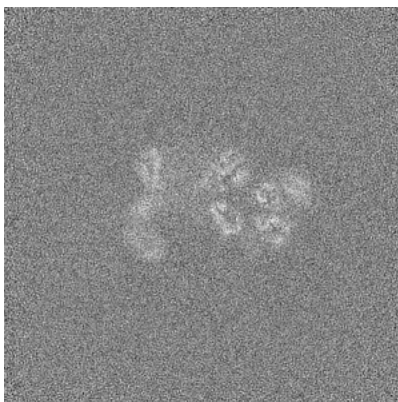


Z Index: 170

6.2.2 Raw map



X Index: 170



Y Index: 170

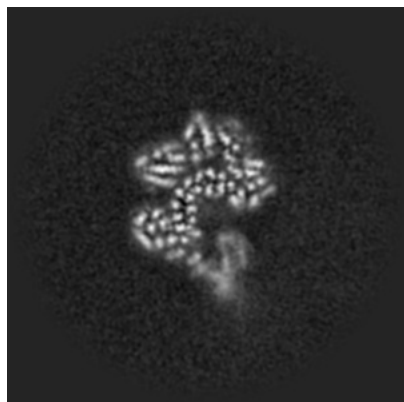


Z Index: 170

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

6.3 Largest variance slices [i](#)

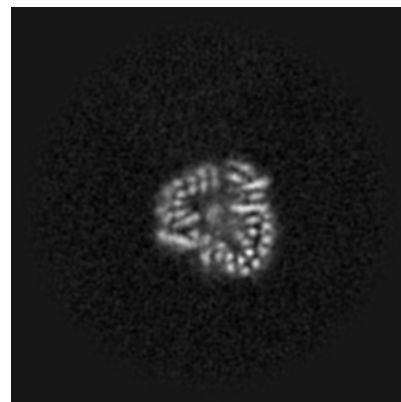
6.3.1 Primary map



X Index: 158

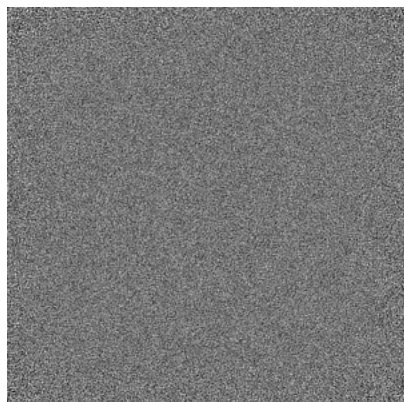


Y Index: 190

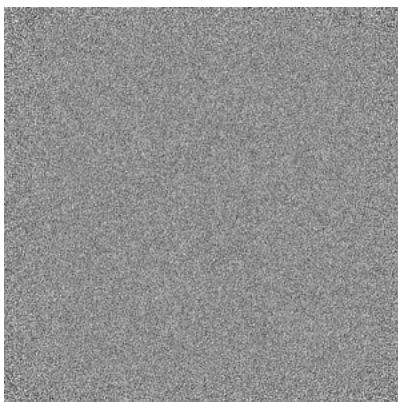


Z Index: 129

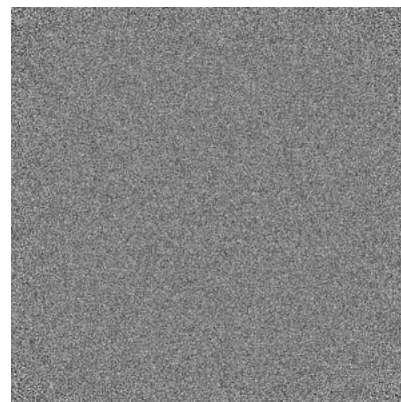
6.3.2 Raw map



X Index: 0



Y Index: 0

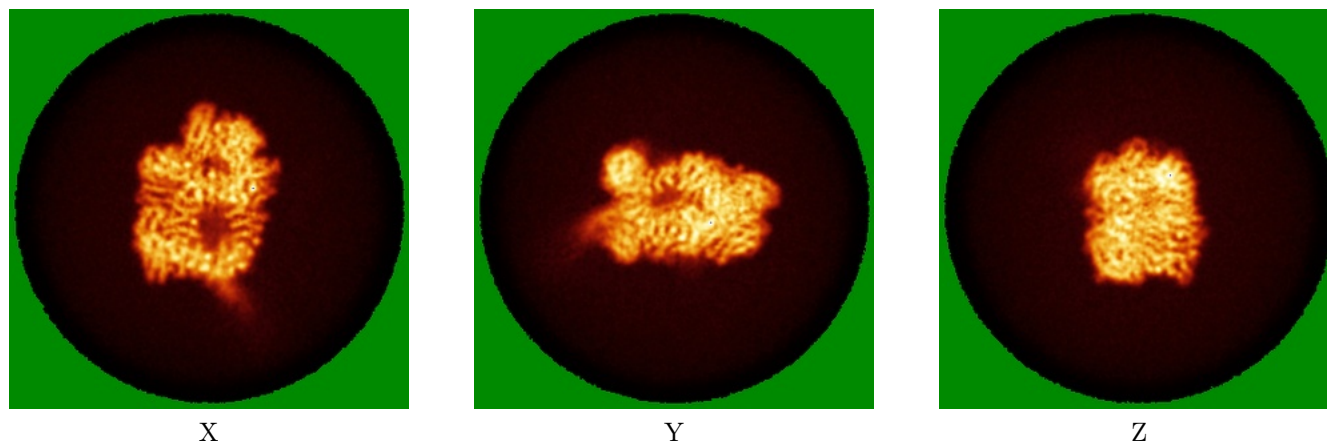


Z Index: 0

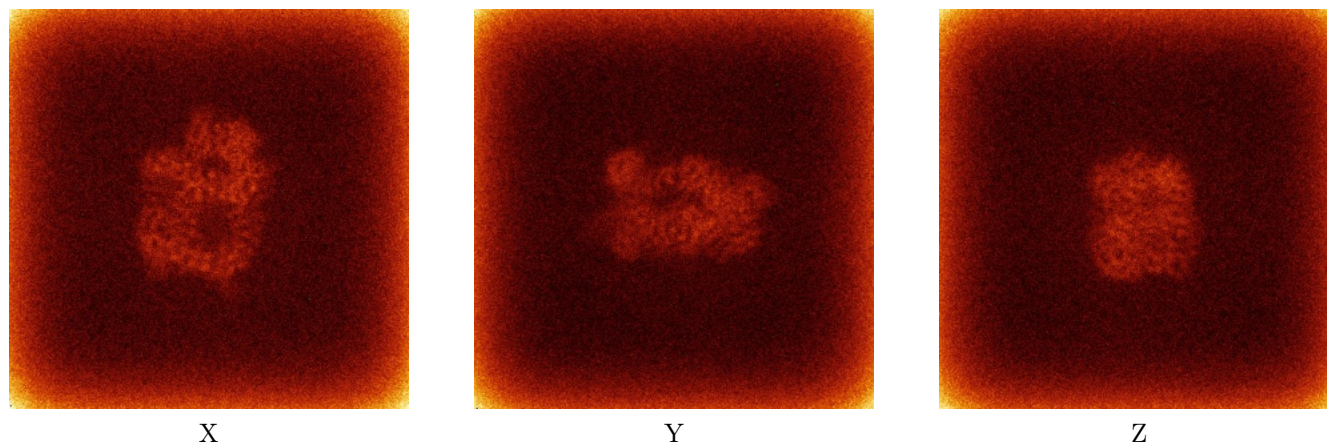
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

6.4.1 Primary map



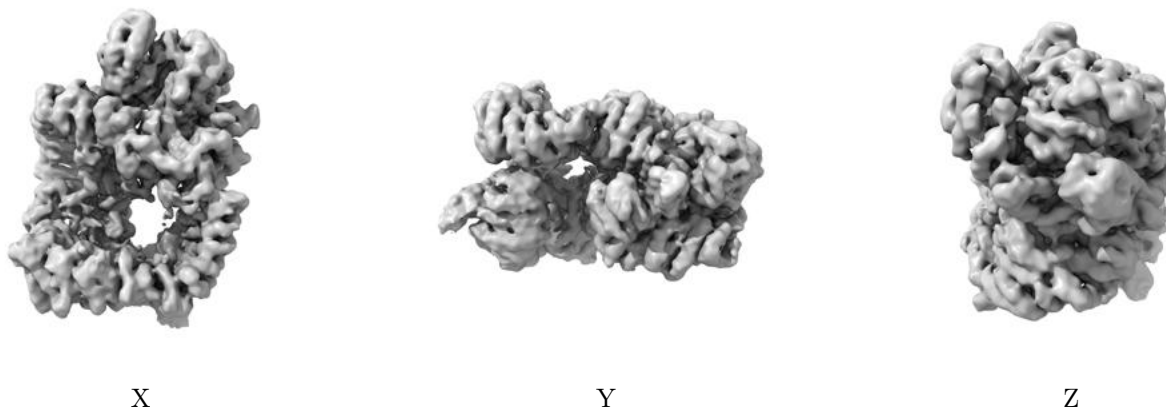
6.4.2 Raw map



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

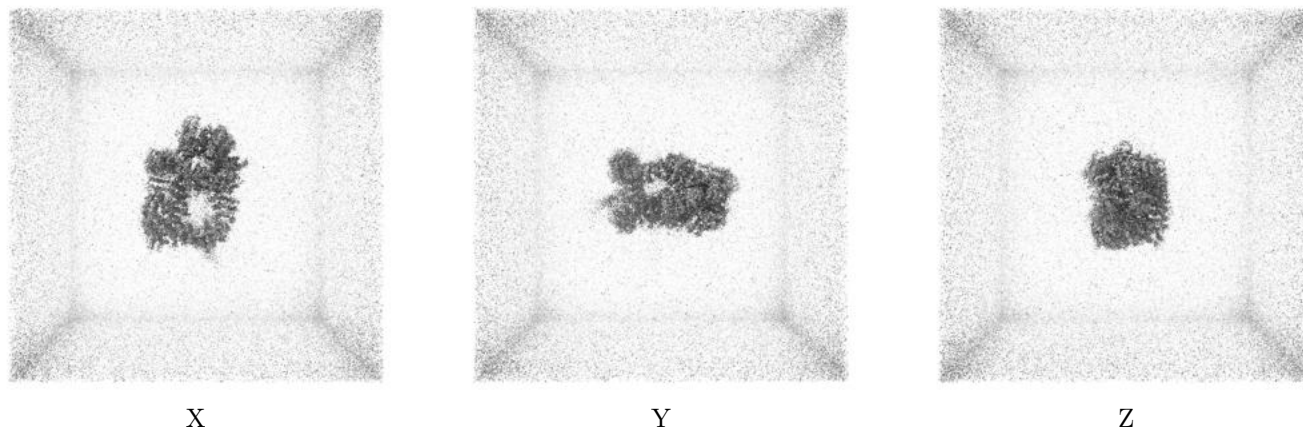
6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.125. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

6.5.2 Raw map



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

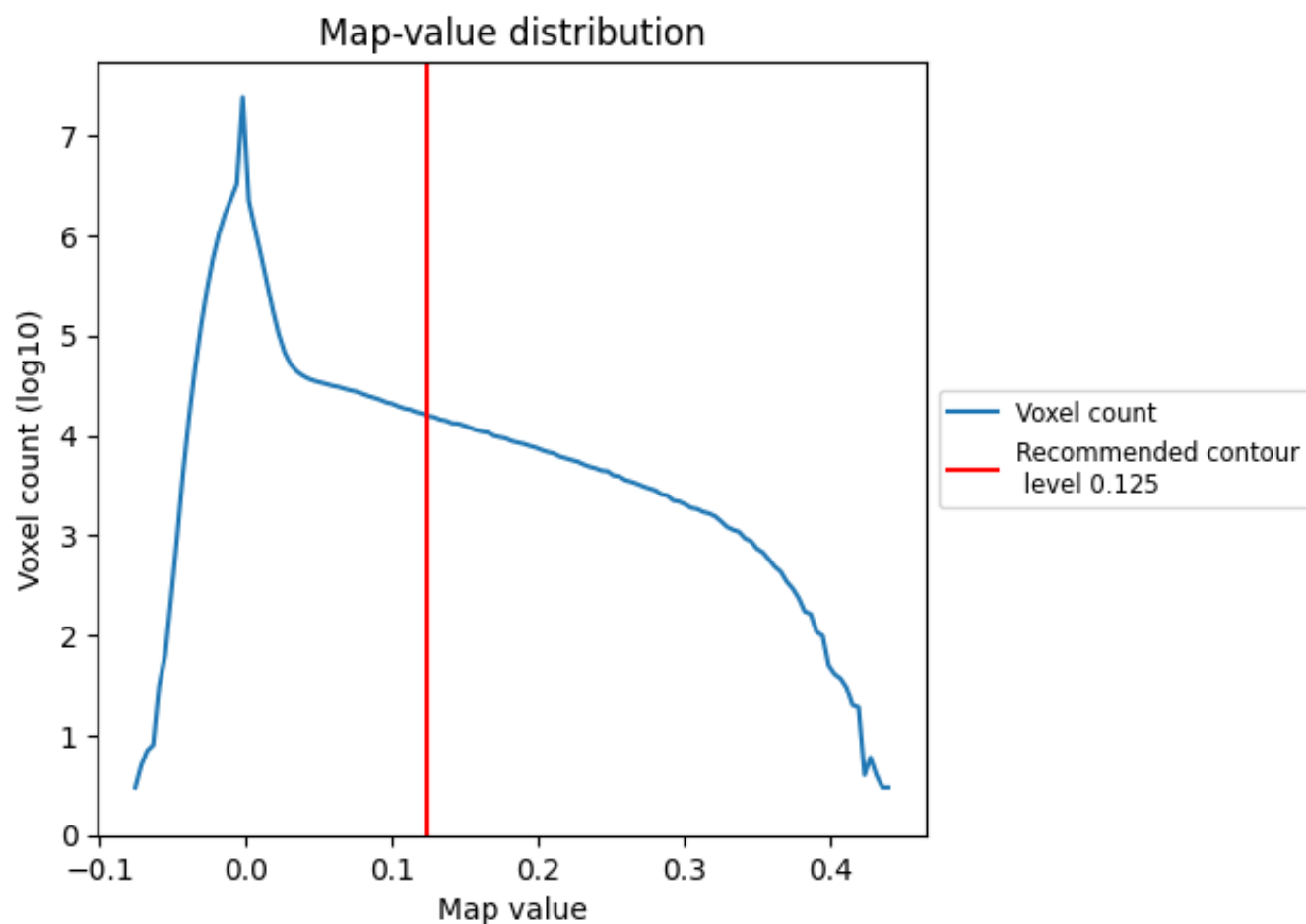
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

7 Map analysis [i](#)

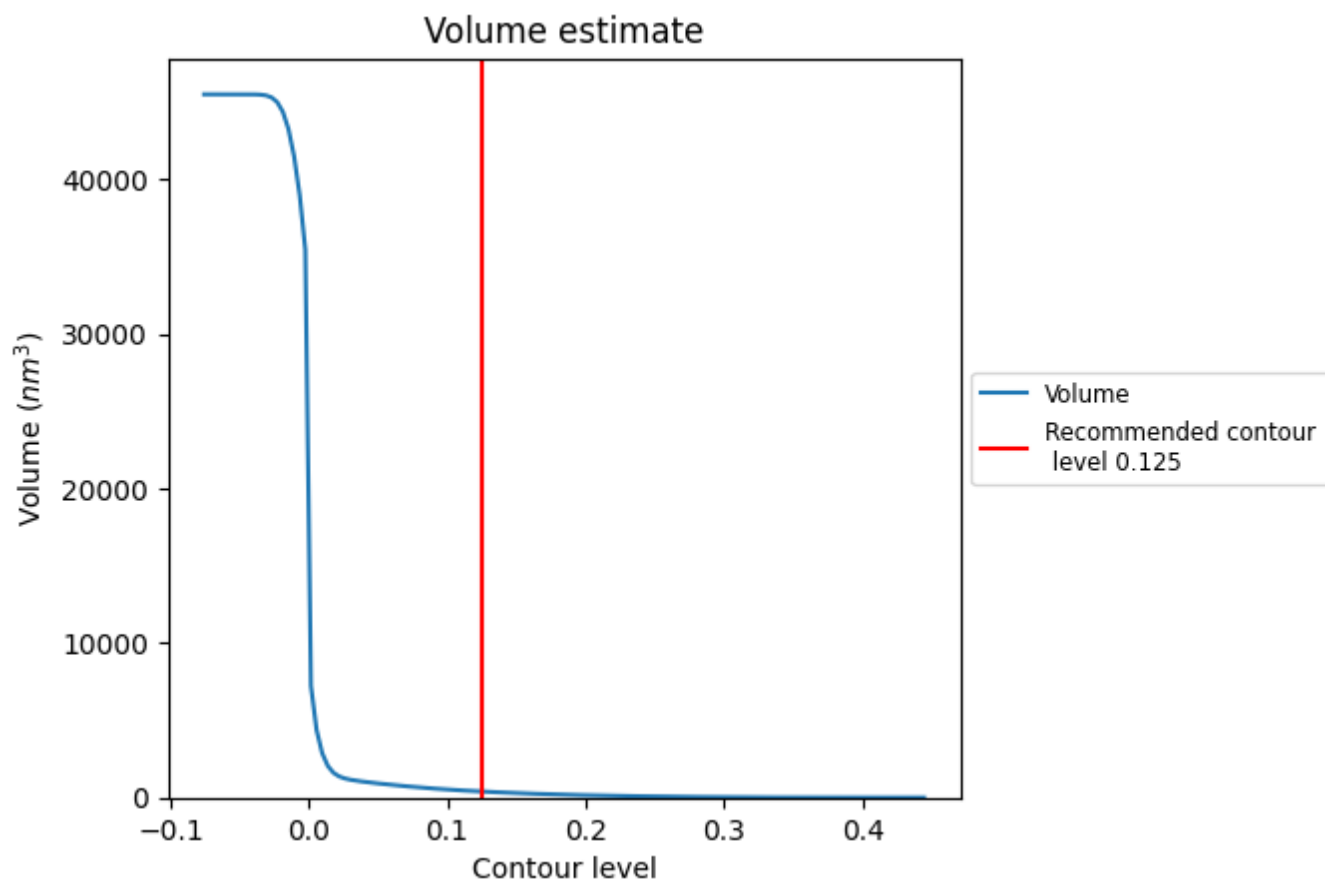
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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.

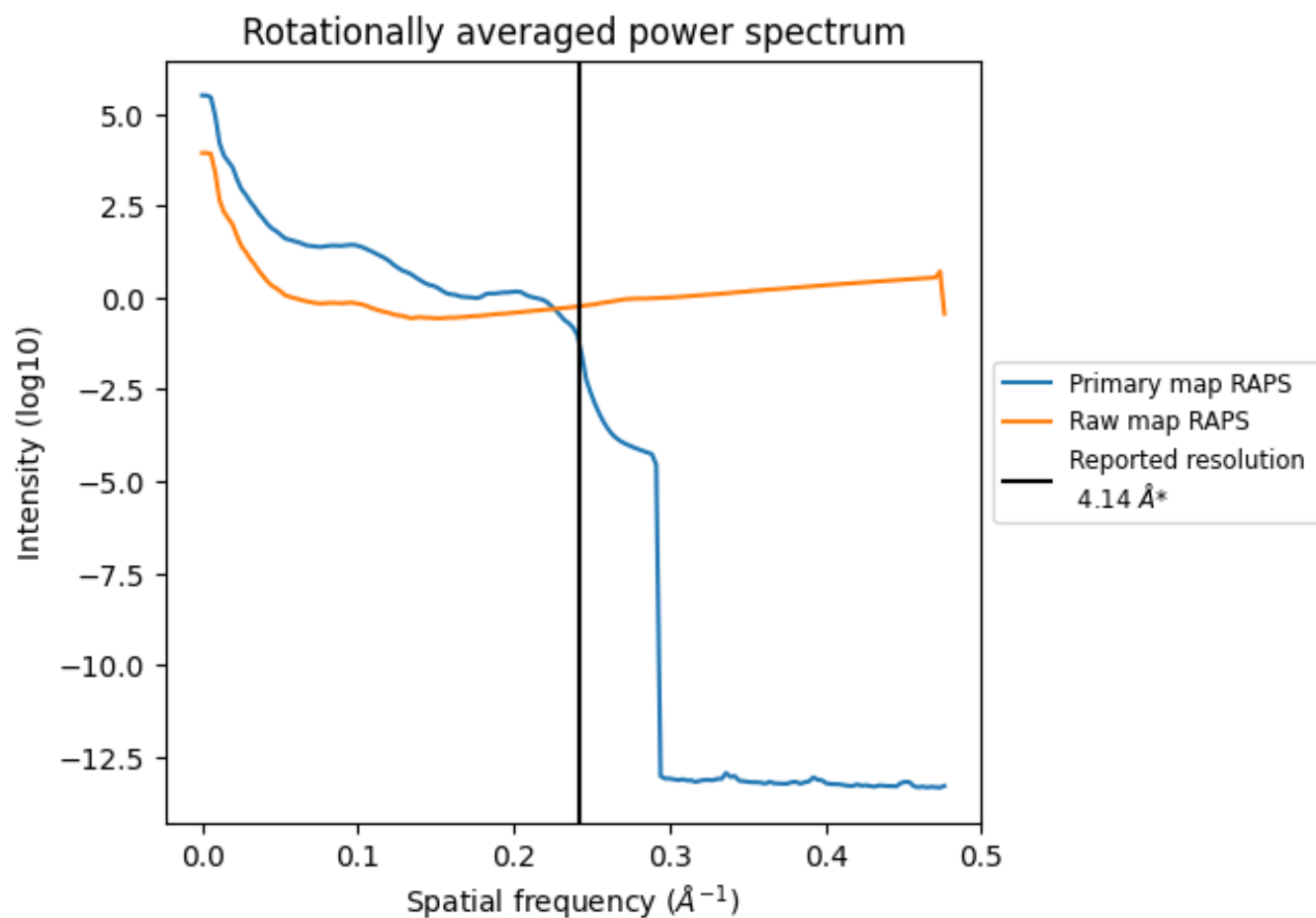
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 392 nm³; this corresponds to an approximate mass of 354 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 ⓘ

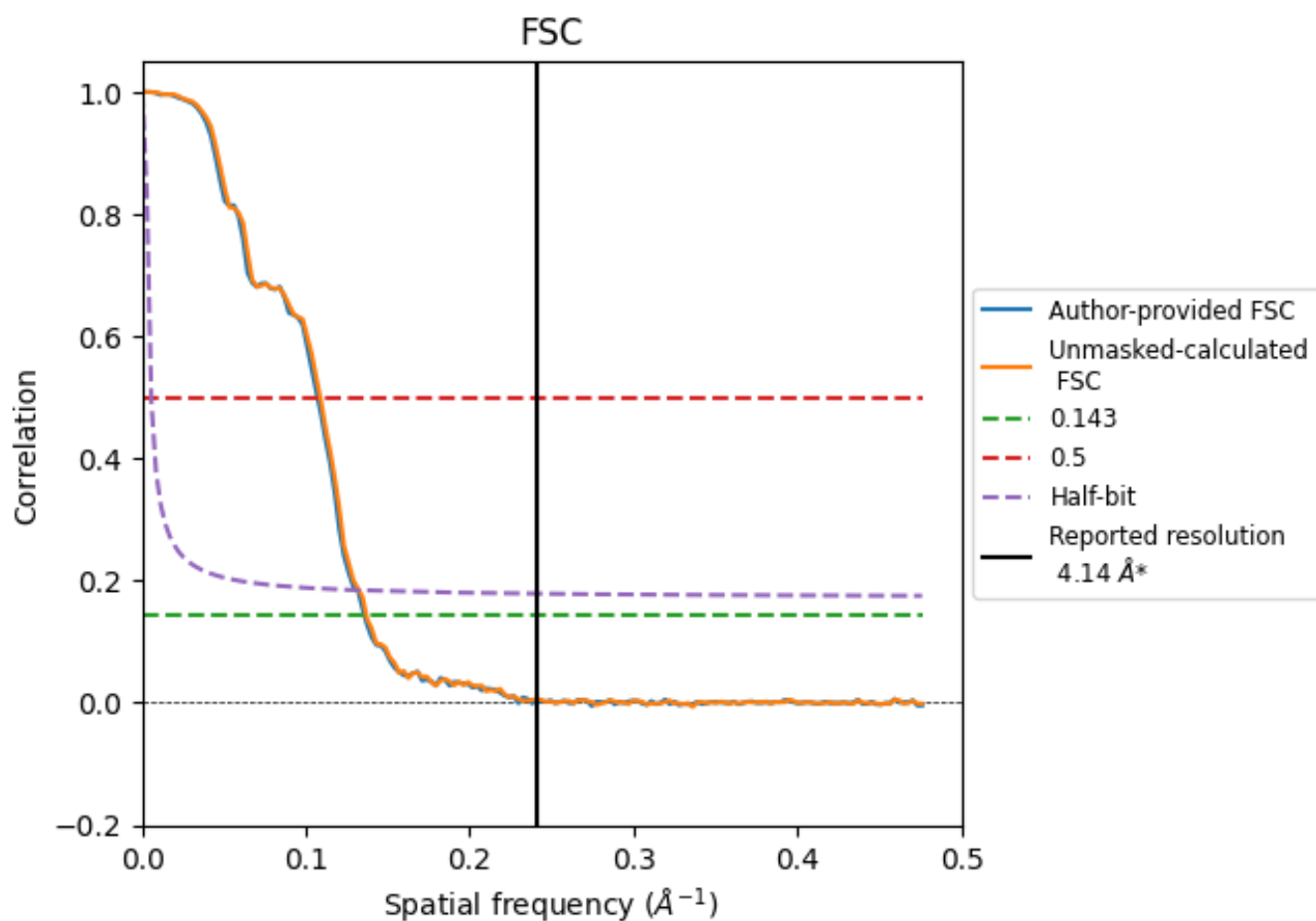


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.242 Å⁻¹

8 Fourier-Shell correlation [i](#)

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

8.1 FSC [i](#)



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.242 $\text{\AA}^{-1}$

8.2 Resolution estimates

Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	4.14	-	-
Author-provided FSC curve	7.37	9.34	7.59
Unmasked-calculated*	7.31	9.20	7.56

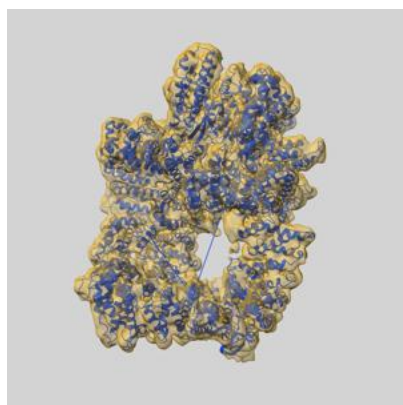
*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps. The value from author-provided FSC intersecting FSC 0.143 CUT-OFF 7.37 differs from the reported value 4.14 by more than 10 %

The value from deposited half-maps intersecting FSC 0.143 CUT-OFF 7.31 differs from the reported value 4.14 by more than 10 %

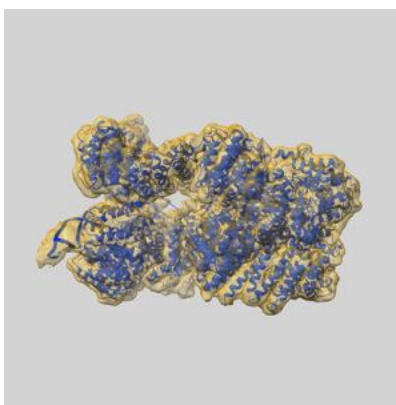
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-11216 and PDB model 6ZH8. Per-residue inclusion information can be found in section [3](#) on page [4](#).

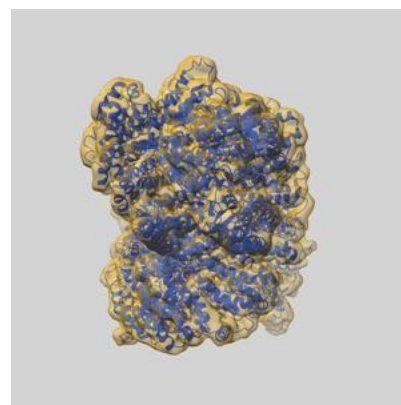
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



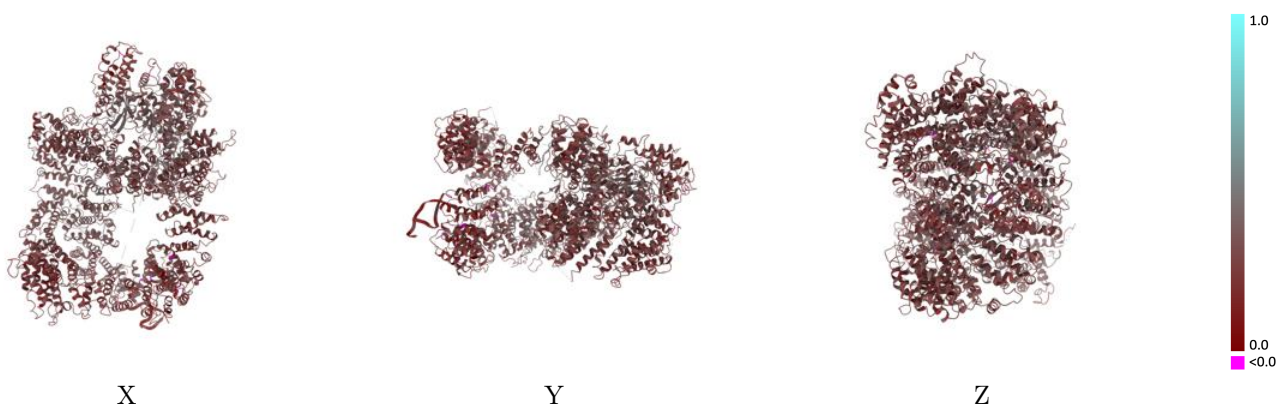
Y



Z

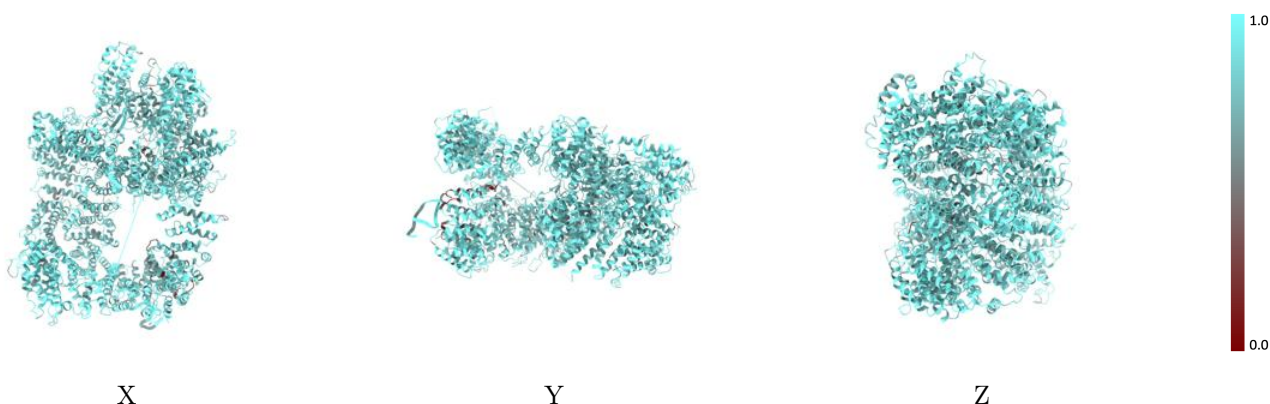
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.125 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



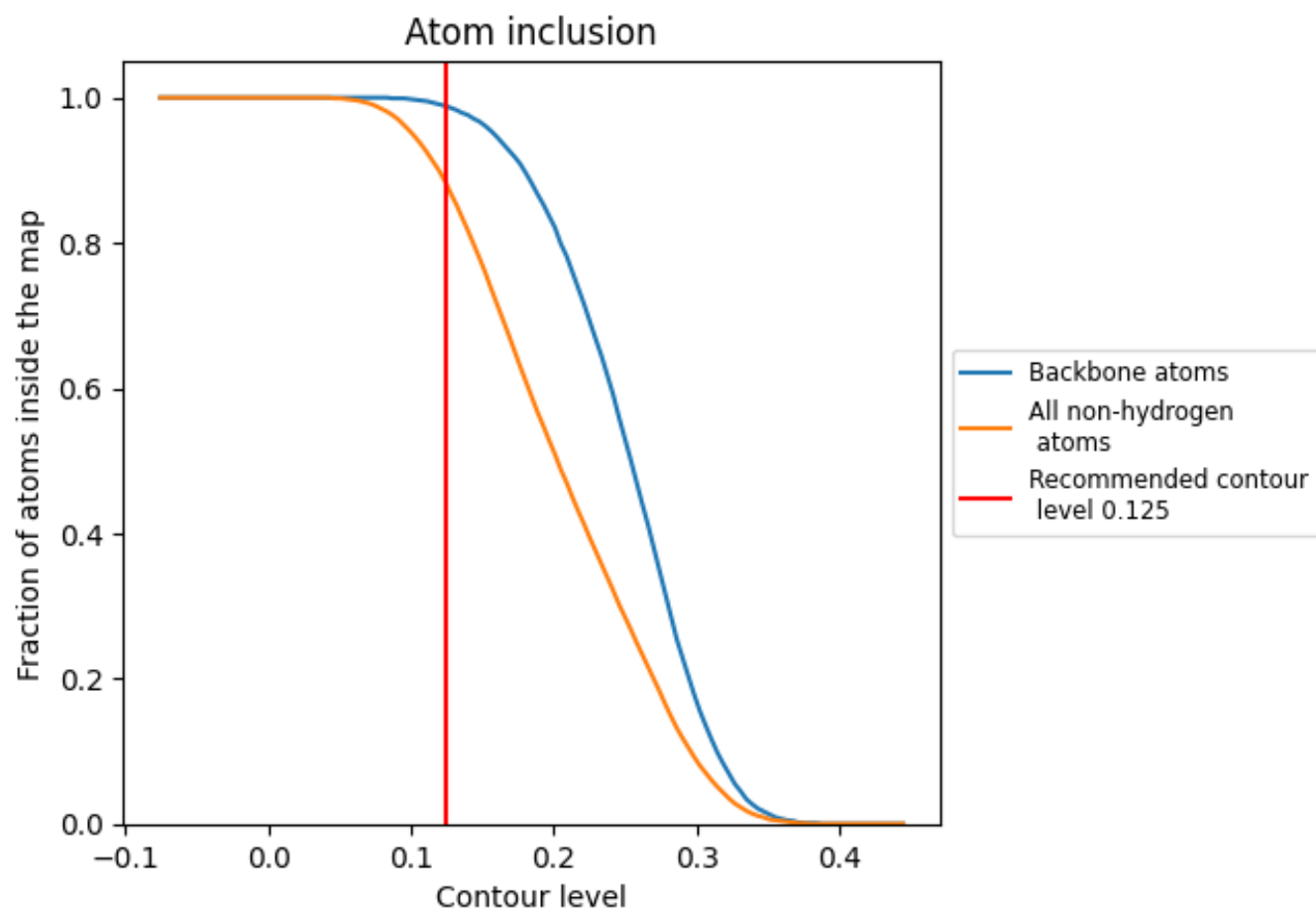
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions 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 (0.125).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 99% of all backbone atoms, 88% 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 (0.125) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.8800	0.2770
A	0.8800	0.2780
B	0.8290	0.2110
C	0.9760	0.2030

