



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Feb 22, 2025 – 01:43 PM EST

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

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

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

A user guide is available at

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

The types of validation reports are described at

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

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev117
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.41.4

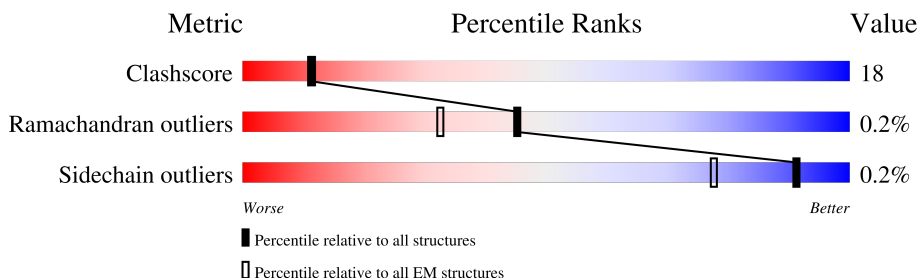
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 9.00 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	210492	15764
Ramachandran outliers	207382	16835
Sidechain outliers	206894	16415

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	4563	<div> <div>37%</div> <div>62%</div> <div>37%</div> <div>.</div> </div>

2 Entry composition

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

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

- Molecule 1 is a protein called Apolipoprotein B 100.

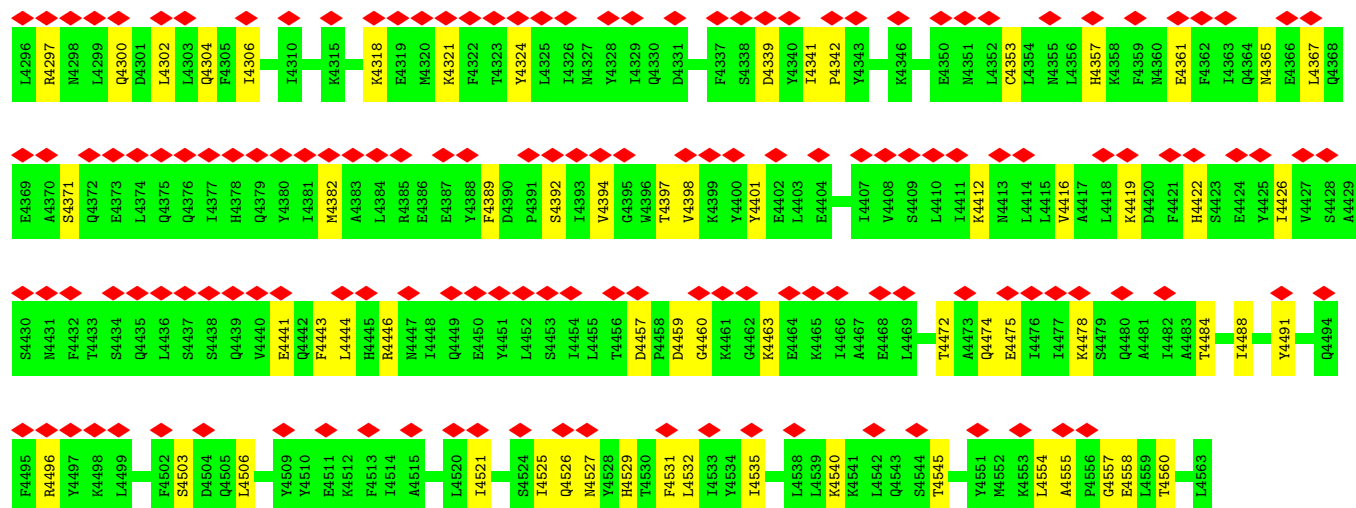
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	4526	Total	C	N	O	S	0	0
			36083	23018	6066	6897	102		



Q2455	Q2456	L2457	L2458	L2459	P2460	Q2461	K2462	A2463	A2464	A2465	L2466	K2467	K2468	F2469	E2470	E2471	E2472	T2473	K2474	A2475	T2476	V2477	A2478	L2479	N2480	L2481	E2482	S2483	L2484	Q2485	K2486	P2487	P2488	L2489	T2490	L2491	T2492	N2493	N2494	N2495	L2496	Q2497	E2498	A2499	L2500	S2501	S2502	A2503	S2504	L2505	A2506	H2507	N2508	A2509	K2510	K2511	T2512	T2513	L2514	E2515
Q2257	T2258	R2259	T2260	Q2261	T2262	Q2263	E2264	L2265	L2266	Q2267	Q2268	L2269	K2270	K2271	H2272	L2273	Q2274	N2275	T2276	D2277	T2278	Q2279	H2280	L2281	A2282	G2283	K2284	L2285	K2286	Q2287	H2288	T2289	E2290	A2291	T2292	D2293	V2294	R2295	V2296	L2297	L2298	D2299	Q2300	L2301	G2302	T2303	T2304	T2305	S2306	F2307	E2308	R2309	I2310	N2311	D2312	T2313	L2314	E2315	H2316	
V2317	K2318	H2319	F2320	V2321	L2322	N2323	L2324	L2325	L2326	D2327	F2328	E2329	V2330	A2331	E2332	K2333	L2334	N2335	A2336	F2337	R2338	A2339	K2340	N2341	H2342	E2343	L2344	E2345	T2346	R2347	Y2348	E2349	V2350	D2351	Q2352	Q2353	L2354	Q2355	V2356	L2357	N2358	D2359	L2360	L2361	V2362	E2363	L2364	A2365	H2366	Q2367	T2368	K2369	L2370	K2371	E2372	L2373	L2374	Q2375	K2376	
L2377	S2378	N2379	V2380	L2381	Q2382	K2385	L2386	K2387	D2388	V2389	F2390	E2391	K2392	L2393	V2394	G2395	D2396	D2399	A2400	K2403	L2404	N2405	E2406	L2407	S2408	E2414	N2417	K2418	P2419	L2420	I2424	K2425	K2426	L2427	K2428	S2429	F2430	D2431	Y2432	H2433	Q2434	T2439	I2443	R2444	T2447	Q2448	R2449	L2450	I2454											
L1917	A1918	L1919	W1920	H1923	Y1928	S1929	K1930	F1931	L1932	L1933	K1934	A1935	F1940	T1941	F1942	S1943	H1944	D1945	D2021	Y1946	K1947	H1952	H1953	L1954	V1955	S1956	R1957	K1958	S1959	I1960	H1966	K1967	V1968	S1969	A1970	L1971	L1972	Q1977	T1978	G1979	T1980	K1981	K1982	K1983	K1984	T1985	Q1986	F1987	E1991	Y1992	Q1994	S1993	D1995							
L1996	D1997	A1998	Y1999	T2000	T2001	W2002	D2003	L2004	T2005	G2006	V2007	R2012	A2015	D2016	L2017	T2018	L2019	L2020	D2021	S2022	P2023	T2024	K2025	V2026	P2027	L2028	L2029	L2030	S2031	E2032	P2033	T2034	W2035	T2036	L2037	D2038	A2039	L2040	E2041	W2042	R2043	D2044	A2045	V2046	E2047	P2048	Q2049	F2052	T2053	T2054	V2055	K2059	Y2060	N2063						
Q2064	D2065	V2066	D2067	S2068	L2069	N2070	L2071	P2072	F2073	P2074	E2075	T2076	L2077	F2081	N2084	R2085	Q2086	E2093	Q2096	R2097	N2098	L2099	K2100	H2101	I2102	N2103	I2104	D2105	Q2106	F2107	V2108	R2109	K2110	Y2111	R2112	A2113	A2114	L2115	G2116	K2117	L2118	P2119	Q2120	Q2121	A2122	N2123	D2124	Y2125	L2126	N2127	S2128	F2129	W2131	E2132						
R2133	Q2134	V2135	S2136	H2137	A2138	K2139	E2140	K2141	L2142	T2143	A2144	L2145	T2146	K2147	K2148	Y2149	R2150	T2151	T2152	E2153	N2154	D2155	L2156	Q2157	T2158	D2161	D2162	A2163	L2164	T2165	N2166	F2167	N2168	E2169	K2170	L2171	S2172	Q2173	L2174	Q2175	T2176	T2177	H2178	T2179	Q2180	F2181	D2182	Q2183	Y2184	T2185	K2186	D2190	L2191	H2192	D2193	L2194				
A2197	T2198	A2199	N2200	T2201	L2202	D2203	E2204	T2205	L2206	E2207	K2208	L2209	K2210	S2211	L2212	D2213	E2214	H2215	Y2216	H2217	T2218	R2219	V2220	N2221	L2222	V2223	K2224	T2225	T2226	H2227	D2228	L2229	H2230	L2231	F2232	T2233	E2234	N2235	T2236	D2237	F2238	N2239	K2240	S2241	G2242	S2243	S2244	T2245	A2246	S2247	W2248	L2249	Q2250	N2251	V2252	D2253	T2254	K2255	Y2256	
Q2257	T2258	R2259	T2260	Q2261	T2262	Q2263	E2264	L2265	L2266	Q2267	Q2268	L2269	K2270	K2271	H2272	L2273	Q2274	N2275	T2276	D2277	T2278	Q2279	H2280	L2281	A2282	G2283	K2284	L2285	K2286	Q2287	H2288	T2289	E2290	A2291	T2292	D2293	V2294	R2295	V2296	L2297	L2298	D2299	Q2300	L2301	G2302	T2303	T2304	T2305	S2306	F2307	E2308	R2309	I2310	N2311	D2312	T2313	L2314	E2315	H2316	
V2317	K2318	H2319	F2320	V2321	L2322	N2323	L2324	L2325	L2326	D2327	F2328	E2329	V2330	A2331	E2332	K2333	L2334	N2335	A2336	F2337	R2338	A2339	K2340	N2341	H2342	E2343	L2344	E2345	T2346	R2347	Y2348	E2349	V2350	D2351	Q2352	Q2353	L2354	Q2355	V2356	L2357	N2358	D2359	L2360	L2361	V2362	E2363	L2364	A2365	H2366	Q2367	T2368	K2369	L2370	K2371	E2372	L2373	L2374	Q2375	K2376	
L2377	S2378	N2379	V2380	L2381	Q2382	K2385	L2386	K2387	D2388	V2389	F2390	E2391	K2392	L2393	V2394	G2395	D2396	D2399	A2400	K2403	L2404	N2405	E2406	L2407	S2408	E2414	N2417	K2418	P2419	L2420	I2424	K2425	K2426	L2427	K2428	S2429	F2430	D2431	Y2432	H2433	Q2434	T2439	I2443	R2444	T2447	Q2448	R2449	L2450	I2454											
Q1592	K1593	Q1594	N1595	A1596	R1599	S1600	E1601	V1602	Q1603	A1604	D1605	S1608	L1609	R1610	F1611	F1612	S1613	L1614	S1618	L1619	E1625	D1629	I1630	L1631	G1632	T1633	D1634	K1635	I1636	G1639	A1640	H1641	K1642	A1643	T1644	I1652	S1655	A1656	T1657	T1658	N1659	L1660	K1661	S1662	S1663	L1664	L1665	V1666	L1667	E1668	N1669									
E1670	L1671	N1672	L1675	S1678	G1679	A1680	K1683	L1684	T1685	T1686	L1687	G1688	R1689	F1690	R1691	F1692	S1693	F1697	S1698	L1699	E1702	A1703	E1707	L1708	G1709	S1712	A1713	Y1714	Q1715	A1716	M1717	I1718	L1719	T1726	F1727	V1731	L1736	K1737	L1738	D1741	L1742	M1743	K1749	K1750	F1751	D1752	H1753													
S1756	L1757	G1761	L1762	D1765	F1766	S1767	Y1774	S1775	T1776	D1777	F1778	F1779	Y1780	K1781	L1786	Q1787	L1788	Q1789	V1794	T1795	D1800	L1801	K1802	D1807	N1811	G1812	K1813	L1814	R1815	P1818	L1819	K1820	L1821	H1822	V1823	A1824	N1825	A1830	N1833	N1834	T1835	E1836	L1837	H1838	I1839	Y1840														
A1841	I1842	S1843	S1844	A1845	A1846	L1847	S1848	A1849	K1852	A1853	D1854	T1855	G1861	S1865	H1866	R1867	T1870	D1871	I1872	A1873	G1874	L1875	A1876	S1877	A1878	I1879	D1880	H1881	S1882	T1883	N1884	Y1885	D1888	S1889	F1892	F1896	R1897	P1902	F1903	T1904	M1905	T1906	I1907	D1908	A1909	H1910	T1911	N1914	G1915	K1916										
L1917	A1918	L1919	W1920	H1923	Y1928	S1929	K1930	F1931	L1932	L1933	K1934	A1935	F1940	T1941	F1942	S1943	H1944	D1945	D2021	Y1946	K1947	H1952	H1953	L1954	V1955	S1956	R1957	K1958	S1959	I1960	H1966	K1967	V1968	S1969	A1970	L1971	L1972	Q1977	T1978	G1979	T1980	K1981	K1982	K1983	K1984	T1985	Q1986	F1987	E1991	Y1992	Q1994	S1993	D1995							
L1996	D1997	A1998	Y1999	T2000	T2001	W2002	D2003	L2004	T2005	G2006	V2007	R2012	A2015	D2016	L2017	T2018	L2019	L2020	D2021	S2022	P2023	T2024	K2025	V2026	P2027	L2028	L2029	L2030	S2031	E2032	P2033	T2034	W2035	T2036	L2037	D2038	A2039	L2040	E2041	W2042	R2043	D2044	A2045	V2046	E2047	P2048	Q2049	F2052	T2053	T2054	V2055	K2059	Y2060	N2063						
Q2064	D2065	V2066	D2067	S2068	L2069	N2070	L2071	P2072	F2073	P2074	E2075	T2076	L2077	F2081	N2084	R2085	Q2086	E2093	Q2096	R2097	N2098	L2099	K2100	H2101	I2102	N2103	I2104	D2105	Q2106	F2107	V2108	R2109	K2110	Y2111	R2112	A2113	A2114	L2115	G2116	K2117	L2118	P2119	Q2120	Q2121	A2122	N2123	D2124	Y2125	L2126	N2127	S2128	F2129	W2131	E2132						
R2133	Q2134	V2135	S2136	H2137	A2138	K2139	E2140	K2141	L2142	T2143	A2144	L2145	T2146	K2147	K2148	Y2149	R2150	T2151	T2152	E2153	N2154	D2155	L2156	Q2157	T2158	D2161	D2162	A2163	L2164	T2165	N2166	F2167	N2168	E2169	K2170	L2171	S2172	Q2173	L2174	Q2175	T2176	T2177	H2178	T2179	Q2180	F2181	D2182	Q2183	Y2184	T2185	K2186	D2190	L2191	H2192	D2193	L2194				
A2197	T2198	A2199	N2200	T2201	L2202	D2203	E2204	T2205	L2206	E2207	K2208	L2209	K2210	S2211	L2212	D2213	E2214	H2215	Y2216	H2217	T2218	R2219	V2220	N2221	L2222	V2223	K2224	T2225	T2226	H2227	D2228	L2229	H2230	L2231	F2232	T2233	E2234	N2235	T2236	D2237	F2238	N2239	K2240	S2241	G2242	S2243	S2244	T2245	A2246	S2247	W2248	L2249	Q2250	N2251	V2252	D2253	T2254	K2255	Y2256	
Q2257	T2258	R2259	T2260	Q2261	T2262	Q2263	E2264	L2265	L2266	Q2267	Q2268	L2269	K2270	K2271	H2272	L2273	Q2274	N2275	T2276	D2277	T2278	Q2279	H2280	L2281	A2282	G2283	K2284	L2285	K2286	Q2287	H2288	T2289	E2290	A2291	T2292	D2293	V2294	R2295	V2296	L2297	L2298	D2299	Q2300	L2301	G2302	T2303	T2304	T2305	S2306	F2307	E2308	R2309	I2310	N2311	D2312	T2313	L2314	E2315	H2316	
V2317	K2318	H2319	F2320	V2321	L2322	N2323	L2324	L2325	L2326	D2327	F2328	E2329	V2330	A2331	E2332	K2333	L2334	N2335	A2336	F2337	R2338	A2339	K2340	N2341	H2342	E2343	L2344	E2345	T2346	R2347	Y2348	E2349	V2350	D2351	Q2352	Q2353	L2354	Q2355	V2356	L2357	N2358	D2359	L2360	L2361	V2362	E2363	L2364	A2365	H2366	Q2367	T2368	K2369	L2370	K2371	E2372	L2373	L2374	Q2375	K2376	
L2377	S2378	N2379	V2380	L2381	Q2382	K2385	L2386	K2387	D2388	V2389	F2390	E2391	K2392	L2393	V2394	G2395	D2396	D2399	A2400	K2403	L2404	N2405	E2406	L2407	S2408	E2414	N2417	K2418	P2419	L2420	I2424	K2425	K2426	L2427	K2428	S2429	F2430	D2431	Y2432	H2433	Q2434	T2439	I2443	R2444	T2447	Q2448	R2449	L2450	I2454											

P3300	K3179	M3111	I3046	N2973	R2907	H2839	D2772	L2708	I2639	M2577	T2516
S3301	N3180	H3114	T3047	L2974	N2908	G2840	T2773	P2709	K2640	K2578	L2516
L3302	R3183	V3115	S3049	V2976	E2909	E2841	N2774	D2710	E2579	E2517	E2518
E3303	T3050	G3116	T3050	E2977	K2911	N2843	A2775	F2711	R2644	L2580	D2518
L3304	N3051	I3117	N3051	S2980	T2912	L2844	G2780	R2712	V2581	V2580	T2519
P3305	S3185	E3120	N3052	S2984	L2913	F2845	T2781	E2712	P2648	V2581	R2520
V3306	L3186	L3123	E3053	K2985	L2914	F2846	T2782	L2713	E2649	E2582	R2520
L3307	T3187	F3125	L3056	L2986	K2915	G2847	A2784	P2714	F2550	Q2583	M2523
K3308	N3188	N3124	F3060	E2987	A2916	N2848	A2785	E2715	T2651	G2584	R2522
R3309	P3189	F3126	P3061	L2988	G2917	N2849	A2786	L2716	T2652	F2585	M2523
V3310	L3190	F3127	L3062	Q2989	H2918	L2850	N2785	A2717	L2652	T2586	Y2524
G3311	A3191	N3127	L3062	S2990	T2919	T2850	N2785	E2718	L2653	T2586	Y2524
Y3312	V3192	I3128	R3063	Q2991	A2920	E2851	N2851	L2718	N2654	V2587	Q2525
L3193	L3193	I3128	R3063	Q2991	V2921	E2851	N2855	P2719	T2655	P2588	Q2526
C3194	P3129	I3128	L3064	V2992	T2922	N2855	N2855	E2720	F2656	E2589	D2527
P3254	F3254	L3130	T3065	D2993	G2927	S2859	S2859	F2721	H2657	K2591	L2528
V3255	P3254	T3130	G3066	S2994	S2928	L2860	L2860	L2722	I2658	K2591	E2531
V3256	K3067	T3131	K3067	Q2995	W2929	H2861	H2861	L2722	P2659	T2592	L2532
V3256	F3196	I3132	I3068	H2996	K2930	T2862	T2862	L2723	S2560	L2593	L2532
N3257	L3197	P3133	D3070	Q2998	W2931	E2863	E2863	P2724	F2665	Q2533	R2534
V3258	S3198	F3134	F3070	G2998	N2931	K2864	K2864	T2725	T2665	G2595	Y2535
E3259	Q3199	E3134	L3071	H2999	P2934	N2865	N2865	L2726	M2668	Q2595	L2535
V3260	S3200	M3135	N3072	S3000	R2935	T2866	T2866	N2727	K2669	T2596	L2536
S3261	L3201	F3136	Y3074	V3001	E2936	L2867	L2867	L2728	M2597		
P3262	K3202	L3137	A3075	T3003	S2937	E2868	E2868	N2729		F2600	
F3263	S3203	P3138	L3076	A3004	D2938	S2870	S2870	D2730	L2673	E2601	
T3264	F3204	Y3139	F3077	K3005	E2939	N2871	N2871	F2731	R2674	V2602	
I3265	D3205	T3140	L3078	G3006	E2939	V2875	V2875	Q2732	T2675	S2603	
E3266	R3206	I3141	S3079	M3007	H2942	K2876	K2876	V2733	I2676	Q2604	
S3267	H3207	I3142	A3082	A3008	E2943	T2877	T2877	P2734	Q2677	Q2605	
K3267	F3208	T3143	Q3083	E3016	S2944	N2878	N2878	D2735	L2678	A2606	
S3268	E3209	P3145	Q3084	F3017	Q2945	N2879	N2879	L2736	Q2678	L2607	
A3269	K3210	P3146	A3085	T3018	E2947	Q2880	Q2880	H2737	N2679	L2608	
F3270	N3211	L3147	S3086	G3019	F2948	L2881	L2881	L2738	L2680	K2609	
G3271	R3212	K3148	Q3088	R3020	E2952	T2882	T2882	P2739	N2681	A2610	
Y3272	N3213	D3149	S3090	A3023	P2953	L2883	L2883	E2740	S2682	T2611	
V3273	K3214	F3150	A3091	H3024	L2954	N2886	N2886	F2741	E2683	F2612	
F3274	A3215	S3151	R3092	L3025	T2955	T2887	T2887	Q2742	L2684	Q2613	
P3275	L3216	L3152	F3093	N3026	S2956	K2888	K2888	L2814	Q2685	T2614	
K3276	D3217	W3153	N3094	G3031	F2957	T2890	F2890	H2745	W2686	P2615	
A3277	F3218	E3154	K3097	T3032	G2958	H2891	K2818	I2746	P2687	D2616	
V3278	V3219	K3155	N3098	L3033	L2959	K2892	L2819	L2750	V2688	F2617	
S3279	S3220	L3158	N3099	N3035	S2960	L2893	N2820	E2751	P2689	L2618	
M3280	K3221	K3159	Q3100	S3036	N2961	N2894	N2820	Q2752	D2690	V2619	
P3281	S3222	E3160	N3101	L3037	K2962	T2895	L2822	P2753	T2691	P2620	
S3282	Y3223	F3161	F3102	F3038	N2964	P2896	A2823	T2754	Y2692	L2621	
F3283	N3224	L3162	S3103	F3039	S2965	K2897	L2824	K2757	L2693	T2622	
S3284	K3224	K3163	G3105	S3040	K2966	L2898	E2826	L2758	D2695	D2623	
I3285	E3225	T3164	N3106	Q3042	H2967	D2899	S2827	L2624	T2694	L2624	
L3286	S3226	T3165	N3107	N3045	R2969	Q2903	S2831	Y2759	D2563	R2625	
Q3287	K3227	K3166	E3108	E3045	N2970	K2904	L2761	S2760	L2696	F2564	
K3288	L3228	Q3167	N3109		N2971	S2832	L2762	K2697	K2697	A2565	
D3289	F3230	D3170	I3110		Q2972	L2906	K2833	E2699	E2699	E2566	
V3290	D3231	L3171						D2700	Q2667	Q2567	
R3291	K3232	Q3176						L2701	L2631	Y2568	
V3292	Y3233	Y3177						T2702	F2633	S2569	
P3293	K3234	K3178						L2703	K2634	T2570	
S3294	A3235							A2704	D2635	D2572	
Y3295	E3236							R2705	L2636	W2573	
T3296	K3237							L2706	K2637	A2574	
L3297	S3238							T2707	N2638	K2575	
I3298	H3239									R2576	





4 Experimental information

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

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.26	0/36813	0.48	0/49814

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	36083	0	36243	1282	0
All	All	36083	0	36243	1282	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 18.

All (1282) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

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

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:352:VAL:HG23	1:A:356:ARG:HH22	1.41	0.86
1:A:1477:GLN:HG2	1:A:1478:HIS:H	1.41	0.85
1:A:144:TYR:HB3	1:A:302:GLY:H	1.41	0.85
1:A:1666:VAL:HG23	1:A:1689:ARG:HH21	1.39	0.85
1:A:536:PRO:HB3	1:A:540:ASP:HB2	1.58	0.84
1:A:175:GLN:HB3	1:A:190:PHE:HB3	1.59	0.84
1:A:1672:ASN:HB3	1:A:1683:LYS:HB3	1.60	0.83
1:A:896:ARG:HH12	1:A:945:VAL:HG12	1.42	0.82
1:A:116:THR:HG23	1:A:118:ASN:H	1.44	0.81
1:A:930:LYS:O	1:A:1006:ARG:NH2	2.14	0.81
1:A:389:GLN:NE2	1:A:390:CYS:SG	2.53	0.81
1:A:136:PRO:HD2	1:A:140:GLN:HB2	1.62	0.81
1:A:1775:SER:HB3	1:A:1778:LYS:HB3	1.61	0.81
1:A:2846:PHE:HB2	1:A:2849:ALA:HB3	1.62	0.81
1:A:2975:VAL:HB	1:A:2987:GLU:HB2	1.63	0.80
1:A:243:GLN:NE2	1:A:245:CYS:SG	2.53	0.80
1:A:529:GLN:OE1	1:A:532:ARG:NH2	2.14	0.80
1:A:801:MET:HG2	1:A:804:ARG:HH21	1.46	0.79
1:A:3069:ASP:OD2	1:A:3092:ARG:NH2	2.15	0.79
1:A:3530:VAL:O	1:A:3549:ASN:HA	1.83	0.79
1:A:1787:GLN:HB2	1:A:1794:VAL:HB	1.63	0.79
1:A:1489:GLN:HB2	1:A:1491:ARG:HH12	1.46	0.78
1:A:77:ASN:O	1:A:97:CYS:HA	1.82	0.78
1:A:3482:SER:HB3	1:A:3493:GLU:HB2	1.65	0.78
1:A:1585:ASN:ND2	1:A:1601:GLU:O	2.16	0.78
1:A:65:PRO:HA	1:A:69:ASP:HA	1.64	0.78
1:A:1094:LEU:HB2	1:A:1106:LEU:HB2	1.66	0.78
1:A:343:GLN:HB3	1:A:346:ASN:HD21	1.49	0.77
1:A:2793:ILE:HB	1:A:2810:ALA:HB3	1.67	0.77
1:A:1416:ASN:HB3	1:A:1443:LEU:HB2	1.65	0.77
1:A:3046:ILE:HB	1:A:3078:LEU:HB2	1.67	0.77
1:A:2973:ASN:HB3	1:A:2989:GLN:HB2	1.67	0.76
1:A:665:ASN:HD22	1:A:701:LEU:HD12	1.49	0.76
1:A:3001:VAL:HG12	1:A:3020:ARG:HH12	1.48	0.76
1:A:3280:MET:O	1:A:3294:SER:HA	1.86	0.76
1:A:2887:THR:HB	1:A:2908:ASN:HB2	1.66	0.76
1:A:3437:ARG:HB2	1:A:3463:ASP:HB3	1.66	0.76
1:A:2844:LEU:HB2	1:A:2851:GLU:HB2	1.68	0.75
1:A:1204:LEU:HD13	1:A:1263:LEU:H	1.52	0.75
1:A:2791:ALA:HB3	1:A:2812:ALA:HB3	1.69	0.75
1:A:3537:LYS:HB3	1:A:3543:ASN:HB3	1.69	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1905:MET:HB3	1:A:1935:ALA:HB3	1.68	0.75
1:A:3533:GLN:NE2	1:A:3535:THR:OG1	2.20	0.75
1:A:433:ALA:HB2	1:A:445:LEU:HD21	1.68	0.75
1:A:320:LYS:HD2	1:A:320:LYS:H	1.52	0.74
1:A:669:LYS:HD2	1:A:670:GLU:HG3	1.68	0.74
1:A:1865:SER:HB3	1:A:1884:ASN:HB2	1.69	0.74
1:A:907:HIS:ND1	1:A:935:LEU:O	2.21	0.74
1:A:2699:GLU:O	1:A:2705:ARG:NH1	2.21	0.74
1:A:1164:ARG:HB2	1:A:1179:ASN:HB2	1.69	0.74
1:A:4488:ILE:HA	1:A:4491:TYR:CE1	2.23	0.74
1:A:1066:ILE:HB	1:A:1071:VAL:HB	1.70	0.74
1:A:1403:ASN:HB3	1:A:1427:ARG:HB2	1.69	0.74
1:A:1546:SER:HB3	1:A:1559:ALA:HB3	1.70	0.73
1:A:1815:ARG:HB2	1:A:1822:HIS:HB2	1.69	0.73
1:A:4371:SER:HB3	1:A:4412:LYS:HE2	1.69	0.73
1:A:1158:GLY:O	1:A:1188:LYS:NZ	2.20	0.73
1:A:3456:SER:HB3	1:A:3481:LEU:HB3	1.71	0.73
1:A:631:ARG:NH2	1:A:666:TYR:O	2.22	0.73
1:A:69:ASP:HB3	1:A:71:ARG:HH12	1.54	0.73
1:A:314:LYS:NZ	1:A:356:ARG:O	2.21	0.73
1:A:1666:VAL:HB	1:A:1689:ARG:HB3	1.71	0.73
1:A:2913:LEU:HB3	1:A:2920:ALA:HB3	1.69	0.73
1:A:100:LYS:HB3	1:A:113:LEU:HB3	1.71	0.73
1:A:145:PRO:HD2	1:A:304:LYS:HB2	1.69	0.73
1:A:431:ASN:OD1	1:A:434:ARG:NH2	2.21	0.73
1:A:1201:PRO:O	1:A:1205:HIS:ND1	2.22	0.73
1:A:1544:LEU:HB3	1:A:1561:LEU:HB2	1.71	0.73
1:A:1449:SER:HB2	1:A:1473:SER:HB3	1.71	0.72
1:A:396:GLN:HG3	1:A:399:LYS:HE2	1.72	0.72
1:A:4416:VAL:HA	1:A:4419:LYS:HE2	1.71	0.72
1:A:2961:ASN:HB3	1:A:2972:GLN:HB2	1.71	0.71
1:A:3669:LEU:HB2	1:A:3700:GLN:HG3	1.71	0.71
1:A:158:ARG:NH1	1:A:311:GLU:OE1	2.23	0.71
1:A:1434:ASN:HB3	1:A:1456:ASP:HB2	1.71	0.71
1:A:2915:LYS:HB2	1:A:2918:HIS:HB3	1.72	0.71
1:A:1944:HIS:HB3	1:A:1968:VAL:HB	1.72	0.71
1:A:327:LYS:O	1:A:330:GLN:HB3	1.90	0.71
1:A:880:SER:OG	1:A:882:GLU:OE2	2.08	0.71
1:A:906:PHE:HB3	1:A:934:LYS:HZ1	1.56	0.71
1:A:324:ALA:HA	1:A:327:LYS:HE3	1.71	0.71
1:A:332:LEU:HD23	1:A:335:LEU:HD12	1.73	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1532:GLN:HE22	1:A:1534:THR:HB	1.54	0.71
1:A:3612:ASP:HB2	1:A:3640:HIS:HA	1.72	0.71
1:A:819:LYS:O	1:A:863:LYS:NZ	2.24	0.70
1:A:825:PHE:O	1:A:857:GLY:CA	2.38	0.70
1:A:838:LEU:HB2	1:A:846:LEU:HD11	1.72	0.70
1:A:1839:ILE:HB	1:A:1854:ASP:HB2	1.73	0.70
1:A:3676:ILE:HA	1:A:3683:SER:HA	1.72	0.70
1:A:3334:MET:HB3	1:A:3358:ASN:HB2	1.73	0.70
1:A:3427:THR:HB	1:A:3442:GLN:HB3	1.72	0.70
1:A:938:GLY:N	1:A:1000:ARG:HH22	1.90	0.69
1:A:1702:LYS:HB3	1:A:1709:SER:HB3	1.73	0.69
1:A:2523:MET:HA	1:A:2526:MET:HG3	1.73	0.69
1:A:4118:GLY:HA2	1:A:4121:ARG:HE	1.56	0.69
1:A:703:ALA:HB1	1:A:764:ASP:HB3	1.74	0.69
1:A:2764:ILE:HD13	1:A:2771:LEU:HB3	1.75	0.69
1:A:601:LEU:HD23	1:A:612:LYS:HG2	1.73	0.69
1:A:1144:ALA:O	1:A:1349:GLN:NE2	2.26	0.69
1:A:1795:THR:H	1:A:1815:ARG:NH2	1.91	0.69
1:A:3071:LEU:HB2	1:A:3090:SER:HB3	1.75	0.69
1:A:807:GLN:HA	1:A:2232:PHE:HD1	1.56	0.69
1:A:1210:ARG:NH2	1:A:4545:THR:OG1	2.25	0.69
1:A:1795:THR:H	1:A:1815:ARG:HH21	1.38	0.69
1:A:1294:LEU:HB2	1:A:1350:VAL:HB	1.74	0.69
1:A:752:ASN:HA	1:A:755:MET:HG2	1.75	0.68
1:A:906:PHE:O	1:A:934:LYS:NZ	2.26	0.68
1:A:315:SER:OG	1:A:356:ARG:O	2.11	0.68
1:A:1658:THR:HB	1:A:1669:ASN:HB2	1.75	0.68
1:A:1911:THR:HB	1:A:1929:SER:HB3	1.75	0.68
1:A:675:THR:HG23	1:A:687:LEU:HB2	1.74	0.68
1:A:3614:PRO:HA	1:A:3638:ARG:O	1.94	0.68
1:A:1521:ARG:NH1	1:A:1522:PHE:O	2.27	0.68
1:A:1409:GLU:HB3	1:A:1421:SER:HB3	1.75	0.68
1:A:60:SER:OG	1:A:74:THR:OG1	2.11	0.68
1:A:3405:PHE:HA	1:A:3432:GLN:HB2	1.75	0.68
1:A:4555:ALA:HB3	1:A:4558:GLU:HB3	1.76	0.68
1:A:2839:HIS:ND1	1:A:2855:ASN:O	2.26	0.67
1:A:3411:ASN:HB2	1:A:3426:ALA:HB3	1.76	0.67
1:A:1399:LEU:HA	1:A:1429:LYS:HE3	1.75	0.67
1:A:1608:SER:O	1:A:1610:ARG:NH1	2.27	0.67
1:A:1368:ASN:HB2	1:A:1394:ASP:HB3	1.76	0.67
1:A:2589:GLU:HA	1:A:2597:MET:O	1.93	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2502:SER:HB3	1:A:2505:LEU:HD23	1.76	0.67
1:A:364:THR:HA	1:A:367:LEU:HD23	1.77	0.67
1:A:54:TYR:OH	1:A:256:VAL:O	2.13	0.67
1:A:1811:ASN:O	1:A:1840:TYR:OH	2.13	0.67
1:A:179:LEU:HD12	1:A:188:THR:HB	1.77	0.67
1:A:1870:THR:HG22	1:A:1871:ASP:H	1.58	0.67
1:A:934:LYS:NZ	1:A:937:SER:OG	2.27	0.67
1:A:1078:ARG:NH1	1:A:1079:VAL:O	2.28	0.67
1:A:1431:LEU:HA	1:A:1459:SER:HA	1.75	0.67
1:A:3514:ALA:HB3	1:A:3533:GLN:HB3	1.77	0.67
1:A:677:LEU:HB3	1:A:687:LEU:HD21	1.78	0.66
1:A:3418:THR:HA	1:A:3850:PHE:HA	1.78	0.66
1:A:332:LEU:HD21	1:A:347:LEU:HD11	1.76	0.66
1:A:2794:THR:HG23	1:A:2809:GLN:HG3	1.75	0.66
1:A:3507:ARG:HE	1:A:3539:ASP:HB3	1.61	0.66
1:A:876:LYS:HG3	1:A:910:GLY:HA3	1.78	0.66
1:A:1162:SER:OG	1:A:1164:ARG:NH1	2.28	0.66
1:A:1178:TRP:HZ3	1:A:1285:VAL:HG23	1.60	0.66
1:A:325:VAL:O	1:A:328:THR:HB	1.96	0.66
1:A:1218:GLN:NE2	1:A:4527:ASN:OD1	2.27	0.66
1:A:1289:LEU:HD22	1:A:1352:LEU:H	1.60	0.66
1:A:677:LEU:HD22	1:A:687:LEU:HD23	1.76	0.66
1:A:3818:SER:HB3	1:A:3864:ILE:HB	1.76	0.66
1:A:49:LEU:N	1:A:84:VAL:O	2.29	0.66
1:A:1111:SER:HB3	1:A:1119:LYS:HB2	1.76	0.66
1:A:2938:ASP:HA	1:A:2966:LYS:HD3	1.78	0.66
1:A:346:ASN:OD1	1:A:347:LEU:N	2.29	0.65
1:A:3543:ASN:O	1:A:3570:HIS:ND1	2.29	0.65
1:A:3628:ASN:HB2	1:A:3805:ASP:HB3	1.77	0.65
1:A:3665:LEU:O	1:A:3703:ARG:NH2	2.29	0.65
1:A:1838:HIS:HE1	1:A:1840:TYR:HB3	1.61	0.65
1:A:3163:LYS:NZ	1:A:3346:SER:O	2.24	0.65
1:A:1413:ASP:HB3	1:A:1417:THR:HB	1.77	0.65
1:A:2070:ASN:ND2	1:A:2075:GLU:OE2	2.27	0.65
1:A:603:SER:HB3	1:A:608:ILE:HD13	1.78	0.65
1:A:1385:LEU:HB3	1:A:1410:THR:HB	1.79	0.65
1:A:187:SER:H	1:A:207:ARG:HH21	1.42	0.65
1:A:328:THR:HG21	1:A:351:LEU:HD21	1.78	0.65
1:A:927:PRO:HA	1:A:1013:GLN:HB2	1.78	0.65
1:A:1112:CYS:HA	1:A:1118:ARG:HA	1.79	0.65
1:A:1823:VAL:HB	1:A:1842:ILE:HB	1.79	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1954:LEU:HB2	1:A:1958:LYS:HB2	1.79	0.65
1:A:106:ASN:HD21	1:A:112:LEU:HD21	1.62	0.65
1:A:1022:LEU:HD11	1:A:1029:LEU:HB3	1.78	0.65
1:A:4105:ARG:HD2	1:A:4503:SER:HB3	1.77	0.65
1:A:1652:ILE:HB	1:A:1675:LEU:HB2	1.79	0.64
1:A:2833:LYS:O	1:A:2836:ARG:NH1	2.30	0.64
1:A:3512:THR:HG23	1:A:3533:GLN:HE22	1.63	0.64
1:A:3537:LYS:HD2	1:A:3540:ASP:HA	1.80	0.64
1:A:2519:THR:O	1:A:2523:MET:HG2	1.98	0.64
1:A:3656:LYS:HG2	1:A:3711:THR:HA	1.80	0.64
1:A:968:GLN:NE2	1:A:970:PHE:O	2.31	0.64
1:A:1041:GLY:O	1:A:1044:GLN:NE2	2.31	0.64
1:A:1813:LYS:HE3	1:A:1824:ALA:HB3	1.80	0.64
1:A:2614:THR:OG1	1:A:2629:VAL:N	2.27	0.64
1:A:4109:GLN:O	1:A:4496:ARG:NH2	2.31	0.64
1:A:766:LYS:HE2	1:A:2215:HIS:HB3	1.79	0.63
1:A:3206:ARG:O	1:A:3209:GLU:HG3	1.98	0.63
1:A:3559:ILE:HB	1:A:3591:LEU:HB3	1.80	0.63
1:A:688:ILE:HD11	1:A:777:LEU:HD11	1.81	0.63
1:A:1513:ARG:HA	1:A:1538:GLU:HA	1.79	0.63
1:A:1661:LYS:NZ	1:A:1663:SER:O	2.31	0.63
1:A:3441:LYS:NZ	1:A:3443:GLU:OE1	2.31	0.63
1:A:3614:PRO:HG3	1:A:3639:ILE:HD13	1.79	0.63
1:A:3723:VAL:HG21	1:A:3811:PHE:HZ	1.63	0.63
1:A:460:THR:OG1	1:A:462:GLU:OE1	2.13	0.63
1:A:1136:GLU:HB2	1:A:1151:ASP:HB3	1.81	0.63
1:A:3783:LEU:HB3	1:A:3786:LEU:HD12	1.81	0.63
1:A:1813:LYS:HD3	1:A:1815:ARG:HG2	1.80	0.63
1:A:3079:SER:OG	1:A:3082:ALA:O	2.16	0.63
1:A:712:PRO:HA	1:A:738:PHE:HB3	1.81	0.63
1:A:959:ASN:HB3	1:A:983:ASN:HB3	1.80	0.63
1:A:3023:ALA:HB3	1:A:3033:LEU:HB2	1.79	0.63
1:A:3827:LEU:HB2	1:A:3855:ILE:HB	1.81	0.63
1:A:3954:PHE:HA	1:A:3979:LYS:O	1.98	0.63
1:A:1176:PHE:O	1:A:1285:VAL:N	2.27	0.63
1:A:1865:SER:O	1:A:1884:ASN:N	2.30	0.63
1:A:4173:ASP:OD1	1:A:4318:LYS:NZ	2.32	0.63
1:A:239:ILE:HG23	1:A:265:HIS:CE1	2.34	0.62
1:A:3745:VAL:HG22	1:A:3762:LYS:HG3	1.81	0.62
1:A:1381:ASP:HA	1:A:2591:LYS:HG2	1.82	0.62
1:A:1549:ASP:OD1	1:A:1556:LYS:NZ	2.33	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:496:GLY:HA3	1:A:534:MET:HG2	1.82	0.62
1:A:2760:SER:HB3	1:A:2775:ALA:HB3	1.81	0.62
1:A:246:GLN:HB2	1:A:260:ILE:HB	1.82	0.62
1:A:2454:ILE:HG23	1:A:2459:LEU:HD12	1.80	0.62
1:A:3079:SER:O	1:A:3083:GLN:NE2	2.32	0.62
1:A:602:ASN:O	1:A:3232:LYS:NZ	2.30	0.62
1:A:817:ILE:HG12	1:A:2240:LYS:HD2	1.82	0.62
1:A:865:GLU:OE1	1:A:870:GLN:NE2	2.33	0.62
1:A:2616:ASP:HB2	1:A:2628:SER:HB3	1.81	0.62
1:A:4138:THR:O	1:A:4142:GLN:NE2	2.32	0.62
1:A:76:ILE:HD13	1:A:99:LEU:HB3	1.82	0.62
1:A:264:GLN:HE22	1:A:281:GLN:HB3	1.65	0.62
1:A:2860:LEU:N	1:A:2867:LEU:O	2.33	0.62
1:A:3248:ILE:O	1:A:3262:PRO:HA	1.99	0.61
1:A:3454:VAL:HB	1:A:3483:LEU:HB3	1.80	0.61
1:A:1641:HIS:ND1	1:A:1658:THR:OG1	2.29	0.61
1:A:3177:TYR:HE1	1:A:3337:ILE:HG12	1.63	0.61
1:A:213:ASP:HB3	1:A:214:ARG:HH11	1.65	0.61
1:A:2977:GLU:HB3	1:A:2985:LYS:HB2	1.82	0.61
1:A:3654:GLN:NE2	1:A:3805:ASP:O	2.33	0.61
1:A:335:LEU:O	1:A:339:GLU:N	2.34	0.61
1:A:807:GLN:O	1:A:2235:ASN:ND2	2.31	0.61
1:A:932:PRO:HA	1:A:1005:LEU:O	2.00	0.61
1:A:3132:ILE:HB	1:A:3147:LEU:HB2	1.81	0.61
1:A:262:LYS:NZ	1:A:283:THR:OG1	2.33	0.61
1:A:3955:SER:OG	1:A:3957:GLU:OE2	2.18	0.61
1:A:1499:GLY:HA2	1:A:1522:PHE:HA	1.82	0.61
1:A:2769:PHE:HE2	1:A:2771:LEU:HB2	1.65	0.61
1:A:3475:GLY:HA3	1:A:3500:VAL:HA	1.81	0.61
1:A:1977:GLN:HB2	1:A:2000:ASN:HB3	1.82	0.61
1:A:3101:ASN:HB2	1:A:3116:GLY:HA3	1.81	0.61
1:A:3712:LYS:HB2	1:A:3878:PRO:HB2	1.82	0.61
1:A:3117:ILE:HB	1:A:3171:LEU:HB3	1.83	0.61
1:A:3180:ASN:ND2	1:A:3333:ALA:O	2.34	0.61
1:A:3223:TYR:HE1	1:A:3306:VAL:HA	1.65	0.61
1:A:3345:SER:OG	1:A:3348:ILE:O	2.17	0.61
1:A:476:ASP:HB3	1:A:512:LYS:HD2	1.81	0.60
1:A:1000:ARG:HH21	1:A:1001:LEU:C	2.04	0.60
1:A:2836:ARG:HH22	1:A:2861:HIS:HB2	1.66	0.60
1:A:4055:LYS:NZ	1:A:4560:THR:OG1	2.34	0.60
1:A:3641:SER:O	1:A:3668:HIS:ND1	2.31	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3986:LEU:HD13	1:A:4003:SER:HB2	1.83	0.60
1:A:4353:CYS:O	1:A:4357:HIS:ND1	2.35	0.60
1:A:49:LEU:HB2	1:A:293:LYS:HZ2	1.67	0.60
1:A:1433:SER:HA	1:A:1457:ALA:HA	1.84	0.60
1:A:428:GLU:HB3	1:A:432:MET:HE1	1.83	0.60
1:A:1821:LEU:HB3	1:A:1844:SER:HB3	1.84	0.60
1:A:3928:LEU:HD13	1:A:3949:PHE:HB2	1.84	0.60
1:A:142:PHE:HA	1:A:306:MET:O	2.02	0.60
1:A:2127:ASN:O	1:A:2130:ASN:ND2	2.32	0.60
1:A:3050:THR:HB	1:A:3074:TYR:HB3	1.83	0.60
1:A:3362:ILE:HB	1:A:3387:LEU:HB3	1.82	0.60
1:A:4243:PHE:HD2	1:A:4270:ARG:HE	1.49	0.60
1:A:1614:LEU:HB3	1:A:1629:ASP:HB2	1.83	0.60
1:A:1952:HIS:HB2	1:A:1960:ILE:HB	1.84	0.60
1:A:2145:LEU:HA	1:A:2149:TYR:HB2	1.82	0.60
1:A:207:ARG:NH1	1:A:208:ASP:O	2.35	0.59
1:A:1206:MET:SD	1:A:1210:ARG:NH2	2.75	0.59
1:A:1489:GLN:HB2	1:A:1491:ARG:NH1	2.15	0.59
1:A:2604:LEU:O	1:A:2608:GLN:HG2	2.01	0.59
1:A:3135:MET:SD	1:A:3144:THR:OG1	2.59	0.59
1:A:3393:LEU:HB2	1:A:3416:LEU:HD12	1.84	0.59
1:A:1684:LEU:HB3	1:A:1699:LEU:HB3	1.84	0.59
1:A:2793:ILE:O	1:A:2810:ALA:N	2.31	0.59
1:A:481:ASP:HB2	1:A:484:TYR:HB3	1.83	0.59
1:A:1177:GLU:OE1	1:A:1179:ASN:ND2	2.35	0.59
1:A:1644:THR:HB	1:A:1655:SER:HB2	1.84	0.59
1:A:1691:ARG:HE	1:A:4392:SER:HG	1.50	0.59
1:A:1942:PHE:HE2	1:A:1968:VAL:HG12	1.67	0.59
1:A:238:LEU:HD13	1:A:269:PRO:HG2	1.84	0.59
1:A:695:LYS:HE3	1:A:772:GLU:HB2	1.85	0.59
1:A:1738:LEU:HD23	1:A:1757:LEU:HD22	1.83	0.59
1:A:3595:GLN:OE1	1:A:3625:ASN:ND2	2.33	0.59
1:A:52:TYR:OH	1:A:253:ARG:NH1	2.36	0.59
1:A:676:THR:HA	1:A:686:ASP:HA	1.85	0.59
1:A:3188:ASN:O	1:A:3327:SER:OG	2.20	0.59
1:A:3788:GLU:N	1:A:3823:SER:OG	2.31	0.59
1:A:3917:CYS:O	1:A:3925:GLU:HA	2.01	0.59
1:A:344:ARG:O	1:A:347:LEU:HG	2.01	0.59
1:A:3673:LYS:NZ	1:A:3693:THR:O	2.24	0.59
1:A:4361:GLU:OE2	1:A:4365:ASN:ND2	2.32	0.59
1:A:2795:ALA:HB3	1:A:2808:PHE:HB3	1.83	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3925:GLU:H	1:A:3952:ARG:NH1	2.01	0.59
1:A:4098:ARG:NH1	1:A:4506:LEU:O	2.35	0.59
1:A:64:VAL:HG12	1:A:66:GLY:H	1.68	0.59
1:A:820:GLY:HA3	1:A:863:LYS:HG3	1.85	0.59
1:A:3123:LEU:HB2	1:A:3166:LYS:HA	1.84	0.59
1:A:69:ASP:HB3	1:A:71:ARG:NH1	2.18	0.59
1:A:246:GLN:N	1:A:260:ILE:O	2.32	0.59
1:A:826:PHE:CD1	1:A:857:GLY:HA3	2.37	0.59
1:A:1177:GLU:HA	1:A:1284:ARG:HA	1.85	0.59
1:A:2216:TYR:HB3	1:A:2218:ILE:HG13	1.85	0.59
1:A:1866:HIS:ND1	1:A:1883:THR:OG1	2.35	0.59
1:A:1982:LYS:HB3	1:A:1984:LYS:HE2	1.85	0.58
1:A:3153:TRP:NE1	1:A:3165:THR:HA	2.18	0.58
1:A:3349:THR:HB	1:A:3371:SER:HB3	1.85	0.58
1:A:3036:SER:HB3	1:A:3051:ASN:HB2	1.85	0.58
1:A:807:GLN:HA	1:A:2232:PHE:CD1	2.38	0.58
1:A:901:MET:HA	1:A:942:LEU:HD13	1.86	0.58
1:A:1134:ARG:N	1:A:1153:SER:O	2.30	0.58
1:A:1434:ASN:N	1:A:1456:ASP:O	2.36	0.58
1:A:336:THR:HG23	1:A:337:ILE:HD12	1.85	0.58
1:A:1401:SER:O	1:A:1429:LYS:NZ	2.32	0.58
1:A:1867:ARG:HB2	1:A:1882:SER:HB3	1.86	0.58
1:A:3598:ALA:HB3	1:A:3622:LEU:HB3	1.84	0.58
1:A:396:GLN:HA	1:A:399:LYS:HG2	1.84	0.58
1:A:558:ARG:NH2	1:A:586:ASN:OD1	2.37	0.58
1:A:1167:TRP:HB2	1:A:1176:PHE:HD1	1.69	0.58
1:A:1463:PRO:HG3	1:A:1492:VAL:HG13	1.84	0.58
1:A:3077:PHE:HB3	1:A:3084:GLN:HG3	1.86	0.58
1:A:3710:TYR:CE2	1:A:3712:LYS:HB3	2.39	0.58
1:A:2131:TRP:HD1	1:A:2358:MET:SD	2.27	0.58
1:A:2199:ALA:HB1	1:A:2286:LYS:HG3	1.86	0.58
1:A:945:VAL:HG22	1:A:950:THR:HG23	1.85	0.58
1:A:1130:GLN:NE2	1:A:1132:GLU:OE1	2.37	0.58
1:A:336:THR:O	1:A:859:LYS:NZ	2.36	0.58
1:A:710:PHE:HB2	1:A:761:LEU:HB2	1.86	0.58
1:A:1614:LEU:N	1:A:1629:ASP:O	2.29	0.58
1:A:3984:THR:HG21	1:A:4005:ALA:HB2	1.84	0.58
1:A:443:TYR:O	1:A:447:HIS:ND1	2.37	0.57
1:A:1885:TYR:HB3	1:A:1892:PHE:HB3	1.86	0.57
1:A:1998:ALA:HA	1:A:2007:VAL:HG12	1.86	0.57
1:A:3357:PHE:HB2	1:A:3363:VAL:HB	1.86	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:234:PRO:O	1:A:238:LEU:HG	2.03	0.57
1:A:699:PRO:HB2	1:A:768:LYS:HD2	1.87	0.57
1:A:2870:SER:HB3	1:A:2888:LYS:HB3	1.86	0.57
1:A:3084:GLN:HA	1:A:3105:GLY:HA2	1.86	0.57
1:A:936:LEU:HB2	1:A:1003:LEU:HB3	1.86	0.57
1:A:192:VAL:HG11	1:A:195:ARG:HB2	1.87	0.57
1:A:1507:ARG:HA	1:A:1514:LEU:HA	1.85	0.57
1:A:1781:LYS:HB2	1:A:1800:ASP:HB2	1.85	0.57
1:A:2608:GLN:O	1:A:2634:LYS:NZ	2.24	0.57
1:A:3590:GLU:HB3	1:A:3597:SER:HB2	1.87	0.57
1:A:4397:THR:HB	1:A:4401:TYR:CZ	2.39	0.57
1:A:1173:LYS:HZ1	1:A:1288:THR:HB	1.68	0.57
1:A:1390:HIS:HE2	1:A:1392:LYS:HB2	1.69	0.57
1:A:2414:GLU:HA	1:A:2745:HIS:HE1	1.70	0.57
1:A:2762:LEU:HD11	1:A:2773:ALA:HB3	1.86	0.57
1:A:3785:THR:OG1	1:A:3832:SER:O	2.23	0.57
1:A:1002:GLU:N	1:A:1002:GLU:OE1	2.38	0.57
1:A:1173:LYS:NZ	1:A:1288:THR:HB	2.19	0.57
1:A:1491:ARG:HG3	1:A:1496:TYR:HA	1.85	0.57
1:A:1521:ARG:NH2	1:A:1528:GLN:OE1	2.38	0.57
1:A:1658:THR:O	1:A:1669:ASN:N	2.32	0.57
1:A:3495:SER:OG	1:A:3497:LYS:NZ	2.36	0.57
1:A:4460:GLY:HA2	1:A:4463:LYS:HE2	1.87	0.57
1:A:2929:TRP:HB2	1:A:2931:TRP:CZ3	2.39	0.57
1:A:3259:GLU:HB3	1:A:3284:SER:HB2	1.86	0.57
1:A:4031:SER:HB3	1:A:4034:LYS:HE2	1.85	0.57
1:A:238:LEU:HD22	1:A:269:PRO:HG3	1.85	0.57
1:A:677:LEU:HD23	1:A:685:ALA:O	2.05	0.57
1:A:3380:LYS:HB3	1:A:3402:SER:HB3	1.87	0.57
1:A:3651:SER:HB2	1:A:3658:HIS:HB2	1.86	0.57
1:A:1940:PHE:HB3	1:A:1972:LEU:HB2	1.87	0.56
1:A:3250:GLY:CA	1:A:3260:VAL:O	2.53	0.56
1:A:3425:VAL:HB	1:A:3444:LEU:HB2	1.85	0.56
1:A:105:PHE:HA	1:A:111:ALA:HA	1.87	0.56
1:A:840:THR:HG22	1:A:846:LEU:HD23	1.85	0.56
1:A:2760:SER:N	1:A:2775:ALA:O	2.36	0.56
1:A:2811:ASN:HD21	1:A:2827:SER:HB3	1.70	0.56
1:A:4089:HIS:CE1	1:A:4095:LEU:HB2	2.40	0.56
1:A:43:ALA:HB2	1:A:168:PRO:HG3	1.88	0.56
1:A:258:GLU:OE1	1:A:287:LYS:HD2	2.06	0.56
1:A:434:ARG:HG2	1:A:469:TYR:CZ	2.40	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:813:ILE:HA	1:A:816:VAL:HG22	1.86	0.56
1:A:975:TYR:CE2	1:A:1003:LEU:HD11	2.40	0.56
1:A:1000:ARG:NH2	1:A:1001:LEU:O	2.35	0.56
1:A:2053:THR:HB	1:A:2765:GLN:HB2	1.86	0.56
1:A:2271:ARG:O	1:A:2275:ASN:ND2	2.28	0.56
1:A:587:GLU:O	1:A:591:ASN:ND2	2.37	0.56
1:A:735:VAL:HG22	1:A:740:TYR:HB3	1.88	0.56
1:A:970:PHE:CD1	1:A:971:PRO:HD2	2.41	0.56
1:A:1668:GLU:HG2	1:A:1670:GLU:OE1	2.05	0.56
1:A:1712:SER:HB3	1:A:1727:PHE:HB2	1.87	0.56
1:A:267:PHE:CE1	1:A:269:PRO:HD2	2.40	0.56
1:A:2875:VAL:HB	1:A:2883:LEU:HD13	1.87	0.56
1:A:3348:ILE:HD12	1:A:3372:SER:HB2	1.87	0.56
1:A:3541:ILE:HG12	1:A:3573:LEU:HG	1.87	0.56
1:A:1477:GLN:HG2	1:A:1478:HIS:N	2.17	0.56
1:A:1818:PRO:O	1:A:1820:LYS:NZ	2.35	0.56
1:A:3621:ALA:HB3	1:A:3632:ARG:HB3	1.87	0.56
1:A:1167:TRP:CH2	1:A:1169:TYR:HB2	2.40	0.56
1:A:1174:ILE:HB	1:A:1287:TYR:HD2	1.70	0.56
1:A:1909:ALA:HB3	1:A:1931:PHE:HB3	1.88	0.56
1:A:777:LEU:HD23	1:A:784:LEU:HD21	1.86	0.56
1:A:3006:GLY:HA2	1:A:3017:PHE:HA	1.88	0.56
1:A:3594:TRP:O	1:A:3625:ASN:ND2	2.38	0.56
1:A:1140:HIS:HB3	1:A:1147:LEU:HB3	1.88	0.56
1:A:2186:LYS:HE2	1:A:2299:ASP:HA	1.87	0.56
1:A:349:ASN:O	1:A:353:THR:OG1	2.13	0.55
1:A:2431:ASP:HB3	1:A:2434:GLN:HB3	1.88	0.55
1:A:3643:SER:OG	1:A:3645:GLN:NE2	2.40	0.55
1:A:3988:LEU:HD13	1:A:4001:ALA:HB2	1.88	0.55
1:A:393:HIS:HA	1:A:396:GLN:OE1	2.07	0.55
1:A:395:LEU:HB3	1:A:432:MET:HE1	1.88	0.55
1:A:1520:LEU:HB3	1:A:1531:ASN:HB3	1.89	0.55
1:A:2614:THR:HG1	1:A:2629:VAL:N	2.04	0.55
1:A:2614:THR:HG1	1:A:2629:VAL:H	1.53	0.55
1:A:943:HIS:ND1	1:A:952:VAL:HA	2.21	0.55
1:A:3199:GLN:O	1:A:3202:LYS:HG2	2.07	0.55
1:A:1481:VAL:HG13	1:A:1506:GLN:HE22	1.71	0.55
1:A:1586:LYS:N	1:A:1601:GLU:OE2	2.40	0.55
1:A:2959:LEU:HB2	1:A:2974:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:3549:ASN:OD1	1:A:3550:PHE:N	2.40	0.55
1:A:3922:GLN:OE1	1:A:3922:GLN:N	2.39	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:181:THR:HG23	1:A:183:TYR:H	1.71	0.55
1:A:331:GLU:O	1:A:335:LEU:HG	2.07	0.55
1:A:2881:LEU:HB2	1:A:2914:LEU:HB3	1.88	0.55
1:A:3568:LYS:HE2	1:A:3583:HIS:HB3	1.87	0.55
1:A:141:VAL:HG21	1:A:308:LEU:HD22	1.88	0.55
1:A:470:LEU:HD12	1:A:492:ILE:HD11	1.89	0.55
1:A:697:PHE:HZ	1:A:773:ALA:HB2	1.71	0.55
1:A:2759:TYR:HD2	1:A:2761:ILE:HG13	1.71	0.55
1:A:2772:ASP:OD1	1:A:2772:ASP:N	2.39	0.55
1:A:3074:TYR:CE2	1:A:3076:LEU:HB2	2.41	0.55
1:A:3705:SER:O	1:A:3886:ARG:NH1	2.39	0.55
1:A:3937:GLU:HG2	1:A:3940:THR:HB	1.89	0.55
1:A:549:LEU:HD22	1:A:580:ILE:HG21	1.89	0.55
1:A:1970:ALA:HA	1:A:1979:GLY:HA2	1.89	0.55
1:A:129:TYR:CD1	1:A:149:GLU:HG2	2.42	0.55
1:A:324:ALA:O	1:A:327:LYS:HG2	2.07	0.55
1:A:1152:SER:HB3	1:A:1163:LYS:HD2	1.89	0.55
1:A:1656:ALA:HB3	1:A:1671:LEU:HD21	1.89	0.55
1:A:1716:ALA:HB1	1:A:1718:ILE:HG12	1.89	0.55
1:A:1852:LYS:NZ	1:A:1854:ASP:OD2	2.40	0.55
1:A:2850:ILE:HB	1:A:2877:ILE:HB	1.89	0.55
1:A:3034:LYS:HB3	1:A:3053:GLU:HB2	1.88	0.55
1:A:405:PRO:HA	1:A:408:ILE:HG12	1.89	0.54
1:A:1837:LYS:NZ	1:A:1838:HIS:O	2.40	0.54
1:A:3629:GLN:HB2	1:A:3652:ASN:HB3	1.88	0.54
1:A:2618:ILE:HD12	1:A:2625:ARG:HD2	1.89	0.54
1:A:756:LEU:HD21	1:A:2201:ILE:HD12	1.89	0.54
1:A:798:LEU:HA	1:A:801:MET:HE3	1.89	0.54
1:A:975:TYR:HA	1:A:1005:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:1476:LYS:HG3	1:A:1477:GLN:OE1	2.07	0.54
1:A:580:ILE:HG22	1:A:584:GLU:HG2	1.88	0.54
1:A:1200:TYR:HB3	1:A:1201:PRO:HD3	1.89	0.54
1:A:1726:ILE:HB	1:A:1741:ASP:HB2	1.89	0.54
1:A:2997:VAL:O	1:A:3026:ASN:N	2.41	0.54
1:A:3780:ALA:HB2	1:A:3790:LYS:HG2	1.90	0.54
1:A:176:VAL:HA	1:A:188:THR:O	2.08	0.54
1:A:207:ARG:NH1	1:A:212:CYS:SG	2.81	0.54
1:A:2054:ILE:HG13	1:A:2764:ILE:HG13	1.90	0.54
1:A:4026:TYR:HB3	1:A:4038:ILE:HD11	1.90	0.54
1:A:569:PRO:HG2	1:A:574:ILE:HD11	1.88	0.54
1:A:818:ARG:NH2	1:A:2237:ASP:OD1	2.36	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1866:HIS:HA	1:A:1883:THR:HA	1.89	0.54
1:A:3352:THR:HA	1:A:3368:SER:HA	1.89	0.54
1:A:3733:PRO:HA	1:A:3767:GLU:HG2	1.90	0.54
1:A:4033:ASP:OD1	1:A:4034:LYS:N	2.39	0.54
1:A:844:LEU:HB3	1:A:889:ILE:HD11	1.90	0.54
1:A:942:LEU:HB3	1:A:953:ILE:HD12	1.89	0.54
1:A:1286:LYS:HE3	1:A:1357:ASP:HB3	1.90	0.54
1:A:3394:LYS:HG2	1:A:3416:LEU:H	1.73	0.54
1:A:675:THR:O	1:A:687:LEU:N	2.41	0.54
1:A:207:ARG:O	1:A:242:SER:OG	2.22	0.54
1:A:883:PHE:HB3	1:A:903:THR:OG1	2.08	0.54
1:A:896:ARG:NH1	1:A:945:VAL:O	2.40	0.54
1:A:91:ILE:HD11	1:A:299:PHE:HD1	1.73	0.54
1:A:99:LEU:HG	1:A:119:SER:HB2	1.90	0.54
1:A:1531:ASN:HD21	1:A:1533:ILE:HG12	1.73	0.54
1:A:1536:ARG:HB2	1:A:1543:SER:HB2	1.90	0.54
1:A:3050:THR:O	1:A:3074:TYR:N	2.40	0.54
1:A:3964:TYR:OH	1:A:3967:LEU:O	2.24	0.54
1:A:1006:ARG:HH21	1:A:1007:PRO:HG2	1.73	0.53
1:A:2906:LEU:HD13	1:A:2927:GLY:HA3	1.89	0.53
1:A:3250:GLY:HA2	1:A:3260:VAL:O	2.07	0.53
1:A:3827:LEU:HB3	1:A:3828:PRO:HD2	1.90	0.53
1:A:102:VAL:HA	1:A:112:LEU:O	2.08	0.53
1:A:3016:GLU:HG2	1:A:3040:SER:HA	1.89	0.53
1:A:797:LYS:HG3	1:A:801:MET:HE2	1.89	0.53
1:A:904:ASN:OD1	1:A:905:PHE:N	2.42	0.53
1:A:1453:LEU:HB3	1:A:1469:VAL:HB	1.90	0.53
1:A:707:LYS:HG3	1:A:708:GLN:HG3	1.90	0.53
1:A:3337:ILE:HD12	1:A:3356:LEU:HD23	1.91	0.53
1:A:67:THR:HG23	1:A:70:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:335:LEU:HA	1:A:338:SER:HB2	1.90	0.53
1:A:1178:TRP:CZ3	1:A:1285:VAL:HG23	2.43	0.53
1:A:1692:GLU:HB3	1:A:4392:SER:HB2	1.91	0.53
1:A:2786:GLU:HA	1:A:2817:PRO:HA	1.90	0.53
1:A:76:ILE:HD12	1:A:77:ASN:H	1.73	0.53
1:A:548:PHE:CE1	1:A:562:TYR:HB2	2.43	0.53
1:A:1424:GLY:N	1:A:1435:ILE:O	2.35	0.53
1:A:352:VAL:HB	1:A:356:ARG:HH12	1.73	0.53
1:A:460:THR:H	1:A:463:LEU:HD13	1.73	0.53
1:A:1096:ILE:HB	1:A:1104:VAL:HB	1.91	0.53
1:A:3215:ALA:O	1:A:3219:VAL:HG23	2.09	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:891:ILE:HG22	1:A:894:PHE:HB2	1.90	0.53
1:A:903:THR:HA	1:A:939:GLY:O	2.09	0.53
1:A:1273:ILE:HD12	1:A:1277:LEU:HD11	1.91	0.53
1:A:2467:LYS:HE2	1:A:2712:ARG:HB3	1.91	0.53
1:A:2855:ASN:ND2	1:A:2871:ASN:O	2.42	0.53
1:A:2886:ASN:OD1	1:A:2887:THR:N	2.42	0.53
1:A:2672:ILE:O	1:A:2676:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:2757:LYS:NZ	1:A:2759:TYR:HB3	2.23	0.52
1:A:3003:THR:HB	1:A:3020:ARG:NH2	2.24	0.52
1:A:599:ASN:ND2	1:A:636:ASN:OD1	2.36	0.52
1:A:1116:GLU:HA	1:A:1141:TRP:HB3	1.91	0.52
1:A:1185:ASP:HB2	1:A:1188:LYS:HE3	1.91	0.52
1:A:1507:ARG:HD2	1:A:1514:LEU:HD12	1.90	0.52
1:A:349:ASN:OD1	1:A:350:LYS:N	2.43	0.52
1:A:1445:ASN:OD1	1:A:1446:ASN:N	2.41	0.52
1:A:3789:VAL:HA	1:A:3821:THR:O	2.09	0.52
1:A:691:GLY:HA3	1:A:776:TYR:CE1	2.45	0.52
1:A:847:GLN:HG2	1:A:890:ILE:HG12	1.91	0.52
1:A:1126:ILE:HG22	1:A:1129:LEU:H	1.74	0.52
1:A:3547:LYS:HE2	1:A:3549:ASN:HB3	1.91	0.52
1:A:845:GLN:OE1	1:A:892:PRO:HD3	2.10	0.52
1:A:2523:MET:SD	1:A:2676:ILE:HG23	2.50	0.52
1:A:1966:HIS:CE1	1:A:1981:TRP:HB3	2.45	0.52
1:A:57:GLU:HA	1:A:76:ILE:O	2.10	0.52
1:A:3482:SER:OG	1:A:3484:GLU:OE2	2.28	0.52
1:A:267:PHE:HB3	1:A:278:MET:HB3	1.91	0.52
1:A:1514:LEU:N	1:A:1537:TYR:O	2.42	0.52
1:A:1582:ALA:HB3	1:A:1605:ASP:HB3	1.91	0.52
1:A:1738:LEU:HB3	1:A:1757:LEU:HB2	1.91	0.52
1:A:2190:ASP:N	1:A:2190:ASP:OD1	2.43	0.52
1:A:2500:LEU:HD12	1:A:2686:TRP:HB3	1.92	0.52
1:A:2930:LYS:HB3	1:A:2939:GLU:HG3	1.92	0.52
1:A:3603:HIS:HB3	1:A:3616:LEU:HB3	1.92	0.52
1:A:3819:GLN:N	1:A:3819:GLN:OE1	2.42	0.52
1:A:529:GLN:HB2	1:A:532:ARG:HH21	1.74	0.52
1:A:934:LYS:HA	1:A:1004:GLU:HA	1.91	0.52
1:A:1855:THR:H	1:A:1867:ARG:HH21	1.57	0.52
1:A:2750:ILE:HG22	1:A:2752:VAL:HG23	1.92	0.52
1:A:2888:LYS:HD2	1:A:2907:ARG:NH2	2.25	0.52
1:A:2967:HIS:HA	1:A:2995:GLN:HE22	1.75	0.52
1:A:3687:PHE:CE1	1:A:4092:HIS:HB3	2.45	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:759:GLU:HG2	1:A:2208:LYS:HE2	1.92	0.51
1:A:3253:VAL:O	1:A:3257:ASN:N	2.43	0.51
1:A:3548:GLU:HA	1:A:3564:GLU:OE2	2.10	0.51
1:A:3822:VAL:O	1:A:3859:GLU:HA	2.09	0.51
1:A:195:ARG:HA	1:A:200:ALA:HA	1.91	0.51
1:A:481:ASP:O	1:A:485:THR:OG1	2.23	0.51
1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ASP:H	1.75	0.51
1:A:813:ILE:HG13	1:A:2240:LYS:HD3	1.91	0.51
1:A:1683:LYS:NZ	1:A:1685:THR:OG1	2.41	0.51
1:A:1811:ASN:N	1:A:1826:ASN:O	2.41	0.51
1:A:2040:LEU:HB3	1:A:2042:MET:HE3	1.92	0.51
1:A:4422:HIS:O	1:A:4426:ILE:HG12	2.10	0.51
1:A:2763:LYS:HG3	1:A:2765:GLN:HE22	1.76	0.51
1:A:938:GLY:H	1:A:1000:ARG:HH22	1.59	0.51
1:A:1524:SER:HB3	1:A:1527:LEU:HB3	1.92	0.51
1:A:3626:THR:OG1	1:A:3627:LYS:N	2.42	0.51
1:A:4021:LYS:HG3	1:A:4023:ASN:HD21	1.76	0.51
1:A:4472:THR:O	1:A:4475:GLU:HG3	2.10	0.51
1:A:79:LYS:NZ	1:A:81:GLU:OE2	2.37	0.51
1:A:1991:GLU:HG2	1:A:2012:ARG:HH22	1.76	0.51
1:A:2668:MET:O	1:A:2672:ILE:HG12	2.11	0.51
1:A:3005:LYS:O	1:A:3018:THR:N	2.40	0.51
1:A:225:LEU:HB3	1:A:829:TYR:HE1	1.75	0.51
1:A:885:THR:OG1	1:A:901:MET:HB3	2.10	0.51
1:A:2649:GLU:HG2	1:A:2660:SER:N	2.24	0.51
1:A:497:GLN:O	1:A:501:GLN:HG2	2.11	0.51
1:A:2105:ASP:O	1:A:2109:ARG:HD3	2.10	0.51
1:A:1179:ASN:HA	1:A:1280:LYS:HZ1	1.76	0.51
1:A:2780:GLY:N	1:A:2788:GLY:O	2.32	0.51
1:A:3040:SER:HG	1:A:3042:GLN:HE21	1.55	0.51
1:A:3110:ILE:HG13	1:A:3178:LYS:HA	1.91	0.51
1:A:3824:GLN:NE2	1:A:3856:ILE:HG23	2.26	0.51
1:A:347:LEU:O	1:A:351:LEU:HD23	2.10	0.51
1:A:599:ASN:O	1:A:638:GLN:NE2	2.44	0.51
1:A:654:LYS:O	1:A:675:THR:HA	2.11	0.51
1:A:896:ARG:NH1	1:A:945:VAL:HG12	2.21	0.51
1:A:2268:GLN:O	1:A:2271:ARG:HG2	2.11	0.51
1:A:1415:LYS:O	1:A:1415:LYS:HD3	2.11	0.51
1:A:1596:ALA:HB3	1:A:1619:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:2017:LEU:HA	1:A:2046:VAL:HA	1.93	0.51
1:A:3149:ASP:O	1:A:3155:LYS:NZ	2.30	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:225:LEU:HB3	1:A:829:TYR:CE1	2.46	0.50
1:A:1120:ILE:HB	1:A:1137:ILE:HB	1.93	0.50
1:A:3365:HIS:ND1	1:A:3383:GLY:O	2.44	0.50
1:A:144:TYR:HB3	1:A:302:GLY:N	2.19	0.50
1:A:379:LEU:HD21	1:A:397:TRP:CZ2	2.46	0.50
1:A:846:LEU:HD12	1:A:846:LEU:O	2.12	0.50
1:A:1712:SER:N	1:A:1727:PHE:O	2.37	0.50
1:A:1956:SER:O	1:A:1957:ARG:HD3	2.11	0.50
1:A:3111:MET:SD	1:A:3111:MET:N	2.84	0.50
1:A:346:ASN:HA	1:A:349:ASN:HD21	1.76	0.50
1:A:875:ALA:C	1:A:876:LYS:HD2	2.31	0.50
1:A:1280:LYS:NZ	1:A:1282:ASP:OD1	2.39	0.50
1:A:3067:LYS:CB	1:A:3092:ARG:HH12	2.24	0.50
1:A:3253:VAL:O	1:A:3257:ASN:HA	2.11	0.50
1:A:827:LEU:O	1:A:855:ALA:HA	2.12	0.50
1:A:1838:HIS:CE1	1:A:1840:TYR:HB3	2.43	0.50
1:A:1908:ASP:HB3	1:A:1910:HIS:HE1	1.76	0.50
1:A:3999:THR:HB	1:A:4011:MET:SD	2.51	0.50
1:A:4038:ILE:HD13	1:A:4062:ALA:HB1	1.92	0.50
1:A:45:ARG:HG3	1:A:166:VAL:HB	1.94	0.50
1:A:120:GLU:CD	1:A:120:GLU:H	2.14	0.50
1:A:382:LEU:HD13	1:A:394:ILE:HD13	1.92	0.50
1:A:2905:ASP:OD1	1:A:2907:ARG:NH2	2.42	0.50
1:A:328:THR:HA	1:A:331:GLU:HG2	1.93	0.50
1:A:2766:SER:OG	1:A:2769:PHE:O	2.27	0.50
1:A:3976:LEU:HD21	1:A:3988:LEU:HD23	1.92	0.50
1:A:427:ARG:NH1	1:A:462:GLU:HB3	2.27	0.50
1:A:484:TYR:O	1:A:488:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:1288:THR:OG1	1:A:1355:VAL:N	2.44	0.50
1:A:1749:MET:SD	1:A:1749:MET:N	2.85	0.50
1:A:59:GLU:HB2	1:A:75:ARG:NH2	2.27	0.50
1:A:526:ALA:O	1:A:529:GLN:NE2	2.44	0.50
1:A:2889:TYR:H	1:A:2907:ARG:HH21	1.60	0.50
1:A:3031:GLY:HA3	1:A:3056:LEU:HD13	1.94	0.50
1:A:3060:PHE:HE2	1:A:3066:GLY:HA3	1.77	0.50
1:A:3464:PHE:HB3	1:A:3473:ALA:HB3	1.92	0.50
1:A:3510:SER:HB2	1:A:3537:LYS:HG2	1.93	0.50
1:A:427:ARG:HH22	1:A:466:ILE:HD11	1.77	0.50
1:A:1789:GLN:HE22	1:A:1794:VAL:HG23	1.76	0.50
1:A:3992:LYS:HG3	1:A:3997:ILE:HG12	1.94	0.50
1:A:4006:VAL:O	1:A:4026:TYR:OH	2.25	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:345:ALA:HB3	1:A:882:GLU:HG3	1.93	0.49
1:A:605:GLU:HB2	1:A:608:ILE:HG22	1.93	0.49
1:A:838:LEU:O	1:A:846:LEU:HG	2.11	0.49
1:A:1691:ARG:NE	1:A:4392:SER:OG	2.35	0.49
1:A:1982:LYS:HZ1	1:A:1997:ASP:CG	2.15	0.49
1:A:3200:SER:O	1:A:3203:SER:OG	2.23	0.49
1:A:3263:PHE:CE1	1:A:3280:MET:HB2	2.46	0.49
1:A:3532:LEU:HB2	1:A:3548:GLU:HB2	1.94	0.49
1:A:1632:GLY:O	1:A:1639:GLY:N	2.33	0.49
1:A:2953:PRO:HB2	1:A:2980:SER:HB2	1.93	0.49
1:A:3649:GLU:OE2	1:A:3651:SER:OG	2.27	0.49
1:A:137:GLU:HG2	1:A:139:LYS:HG2	1.94	0.49
1:A:1507:ARG:HH12	1:A:1509:PRO:HB3	1.78	0.49
1:A:2351:ASP:OD1	1:A:2351:ASP:N	2.43	0.49
1:A:92:LEU:HD12	1:A:131:LEU:HD23	1.92	0.49
1:A:830:ILE:HD12	1:A:853:VAL:HG22	1.95	0.49
1:A:927:PRO:HA	1:A:1013:GLN:CB	2.43	0.49
1:A:1693:HIS:CD2	1:A:1719:LEU:H	2.30	0.49
1:A:1928:TYR:HB2	1:A:1947:LYS:HB2	1.94	0.49
1:A:2624:LEU:HG	1:A:2648:PRO:HB3	1.94	0.49
1:A:3439:ASN:HB2	1:A:3461:LYS:HE3	1.94	0.49
1:A:3664:SER:HA	1:A:3703:ARG:HE	1.78	0.49
1:A:3828:PRO:HA	1:A:3840:LEU:HD12	1.93	0.49
1:A:355:LEU:HA	1:A:358:LEU:HD12	1.95	0.49
1:A:399:LYS:HD3	1:A:432:MET:SD	2.51	0.49
1:A:409:ASP:HB3	1:A:440:ALA:HB3	1.95	0.49
1:A:1642:LYS:N	1:A:1657:THR:O	2.28	0.49
1:A:2911:LYS:NZ	1:A:2912:THR:O	2.43	0.49
1:A:3389:ARG:NH1	1:A:3849:ASP:OD2	2.46	0.49
1:A:814:GLY:O	1:A:817:ILE:HG13	2.11	0.49
1:A:1657:THR:HG23	1:A:1670:GLU:HG3	1.94	0.49
1:A:3831:VAL:HG23	1:A:3838:LEU:HB3	1.95	0.49
1:A:526:ALA:HA	1:A:529:GLN:HG3	1.94	0.49
1:A:1152:SER:H	1:A:1164:ARG:NH2	2.11	0.49
1:A:1880:ASP:HB2	1:A:1897:ARG:HH11	1.77	0.49
1:A:1917:LEU:HB3	1:A:1923:HIS:HB2	1.95	0.49
1:A:4243:PHE:HB2	1:A:4270:ARG:HH21	1.78	0.49
1:A:4382:MET:SD	1:A:4401:TYR:HB3	2.53	0.49
1:A:1612:PHE:CE2	1:A:1614:LEU:HB2	2.48	0.49
1:A:1966:HIS:HE1	1:A:1981:TRP:HB3	1.78	0.49
1:A:3572:GLN:HG3	1:A:3574:GLU:H	1.78	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:497:GLN:HG2	1:A:498:THR:N	2.28	0.49
1:A:748:GLN:HB3	1:A:752:ASN:HB2	1.94	0.49
1:A:810:PRO:HB2	1:A:2235:ASN:O	2.11	0.49
1:A:2862:THR:HG23	1:A:2865:ASN:H	1.78	0.49
1:A:156:ILE:O	1:A:160:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:914:HIS:N	1:A:925:ILE:O	2.45	0.48
1:A:1133:ALA:HA	1:A:1154:ALA:HA	1.95	0.48
1:A:1301:PRO:HG2	1:A:2572:ASP:HA	1.95	0.48
1:A:1506:GLN:O	1:A:1515:ASN:N	2.42	0.48
1:A:1731:VAL:HG22	1:A:1736:LEU:HD13	1.93	0.48
1:A:3298:ILE:HD13	1:A:3313:LEU:HD13	1.95	0.48
1:A:3507:ARG:NH2	1:A:3539:ASP:O	2.46	0.48
1:A:990:ALA:HB1	1:A:996:THR:HG21	1.95	0.48
1:A:59:GLU:OE2	1:A:61:SER:HB3	2.14	0.48
1:A:157:LYS:O	1:A:161:ILE:HG12	2.13	0.48
1:A:176:VAL:HA	1:A:189:HIS:HA	1.93	0.48
1:A:272:TYR:HE2	1:A:995:LEU:HG	1.77	0.48
1:A:778:ARG:NH1	1:A:783:GLU:OE2	2.45	0.48
1:A:1218:GLN:OE1	1:A:4526:GLN:NE2	2.46	0.48
1:A:3076:LEU:HD21	1:A:3078:LEU:HG	1.94	0.48
1:A:429:ILE:HG12	1:A:445:LEU:HD22	1.95	0.48
1:A:900:GLN:O	1:A:902:ASN:ND2	2.46	0.48
1:A:2038:ASP:HB2	1:A:4252:THR:HB	1.95	0.48
1:A:2888:LYS:NZ	1:A:2890:PHE:HB2	2.28	0.48
1:A:3669:LEU:HB3	1:A:3672:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:3703:ARG:HB2	1:A:3890:ASP:HB3	1.95	0.48
1:A:140:GLN:HB3	1:A:142:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:1247:TYR:CE1	1:A:1272:HIS:HA	2.49	0.48
1:A:2797:GLY:HA3	1:A:2806:PHE:CE1	2.48	0.48
1:A:141:VAL:HG11	1:A:308:LEU:HD13	1.95	0.48
1:A:396:GLN:HA	1:A:399:LYS:HE2	1.94	0.48
1:A:2523:MET:SD	1:A:2676:ILE:HD12	2.52	0.48
1:A:844:LEU:HD12	1:A:891:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:900:GLN:O	1:A:942:LEU:HA	2.13	0.48
1:A:1405:GLN:HE21	1:A:1425:SER:HB3	1.78	0.48
1:A:2543:TYR:HE2	1:A:2610:ALA:HB2	1.78	0.48
1:A:2929:TRP:HZ2	1:A:2965:SER:HB2	1.78	0.48
1:A:3205:ASP:HB3	1:A:3314:LYS:HD2	1.96	0.48
1:A:48:HIS:O	1:A:50:ARG:NH1	2.47	0.48
1:A:98:THR:HB	1:A:115:LYS:HZ3	1.79	0.48
1:A:361:GLU:O	1:A:364: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:672:MET:SD	1:A:672:MET:N	2.87	0.48
1:A:2001:THR:OG1	1:A:2003:ASP:OD1	2.22	0.48
1:A:2527:ASP:HB3	1:A:2669:LYS:HE3	1.94	0.48
1:A:3212:ARG:O	1:A:3216:LEU:N	2.38	0.48
1:A:3045:GLU:OE2	1:A:3047:THR:OG1	2.24	0.48
1:A:4103:LYS:O	1:A:4106:ARG:HG3	2.13	0.48
1:A:4117:GLN:O	1:A:4121:ARG:HG2	2.14	0.48
1:A:49:LEU:H	1:A:85:PRO:HA	1.79	0.48
1:A:2059:LYS:HB2	1:A:2759:TYR:OH	2.13	0.48
1:A:2906:LEU:O	1:A:2907:ARG:NH2	2.47	0.48
1:A:217:PRO:HA	1:A:838:LEU:HD21	1.95	0.47
1:A:369:GLN:O	1:A:372:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:2795:ALA:O	1:A:2808:PHE:N	2.45	0.47
1:A:3021:HIS:NE2	1:A:3023:ALA:HB2	2.27	0.47
1:A:3527:ARG:HG2	1:A:3553:GLU:HG3	1.96	0.47
1:A:51:LYS:HA	1:A:82:LEU:O	2.15	0.47
1:A:100:LYS:CB	1:A:113:LEU:HB3	2.43	0.47
1:A:131:LEU:HD22	1:A:157:LYS:HD2	1.97	0.47
1:A:144:TYR:HA	1:A:304:LYS:O	2.14	0.47
1:A:497:GLN:HB3	1:A:533:LYS:HD3	1.95	0.47
1:A:586:ASN:O	1:A:589:VAL:N	2.47	0.47
1:A:830:ILE:HG12	1:A:833:GLU:HB2	1.95	0.47
1:A:2492:ILE:O	1:A:2495:TRP:HB3	2.14	0.47
1:A:3253:VAL:O	1:A:3257:ASN:CA	2.62	0.47
1:A:3522:ASN:OD1	1:A:3523:SER:N	2.48	0.47
1:A:3734:GLY:O	1:A:3736:LYS:NZ	2.34	0.47
1:A:4321:LYS:HE3	1:A:4324:TYR:HE2	1.79	0.47
1:A:183:TYR:O	1:A:214:ARG:HD3	2.14	0.47
1:A:1641:HIS:HA	1:A:1658:THR:HA	1.95	0.47
1:A:3957:GLU:OE1	1:A:3979:LYS:NZ	2.31	0.47
1:A:845:GLN:HB2	1:A:890:ILE:HB	1.96	0.47
1:A:932:PRO:HG3	1:A:1006:ARG:CZ	2.44	0.47
1:A:1373:TYR:HD1	1:A:1389:TYR:HB3	1.79	0.47
1:A:1484:VAL:HB	1:A:1503:LEU:HB3	1.96	0.47
1:A:1642:LYS:O	1:A:1657:THR:N	2.43	0.47
1:A:3705:SER:C	1:A:3886:ARG:HH12	2.17	0.47
1:A:3919:SER:HB3	1:A:3924:LEU:HB2	1.97	0.47
1:A:153:ILE:HG22	1:A:157:LYS:NZ	2.30	0.47
1:A:411:VAL:HA	1:A:414:LEU:HG	1.96	0.47
1:A:763:LYS:HE2	1:A:2208:LYS:HE3	1.96	0.47
1:A:2230:HIS:CD2	1:A:2270:LYS:HB2	2.49	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3097:LYS:NZ	1:A:3120:GLU:OE1	2.39	0.47
1:A:3511:GLY:HA2	1:A:3536:SER:HA	1.97	0.47
1:A:3631:ILE:HD13	1:A:3650:LEU:HD22	1.95	0.47
1:A:3925:GLU:HB2	1:A:3952:ARG:NH2	2.29	0.47
1:A:3976:LEU:HG	1:A:3988:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:4054:ILE:O	1:A:4560:THR:HA	2.14	0.47
1:A:100:LYS:HE2	1:A:113:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:914:HIS:HD2	1:A:927:PRO:HD3	1.80	0.47
1:A:1083:SER:HA	1:A:1088:THR:HA	1.96	0.47
1:A:1437:PHE:CE2	1:A:1439:HIS:HB2	2.50	0.47
1:A:2988:ILE:O	1:A:3003:THR:HG23	2.14	0.47
1:A:3777:SER:HA	1:A:3793:GLU:HG2	1.96	0.47
1:A:4398:VAL:HA	1:A:4401:TYR:CD2	2.49	0.47
1:A:92:LEU:HB2	1:A:131:LEU:HB3	1.96	0.47
1:A:152:TYR:HB3	1:A:892:PRO:HG2	1.97	0.47
1:A:188:THR:HG23	1:A:207:ARG:HB2	1.95	0.47
1:A:343:GLN:HB3	1:A:346:ASN:ND2	2.25	0.47
1:A:367:LEU:N	1:A:368:PRO:HD2	2.30	0.47
1:A:423:ALA:HA	1:A:426:LEU:HD12	1.95	0.47
1:A:537:LYS:HG3	1:A:538:ASP:N	2.30	0.47
1:A:697:PHE:CZ	1:A:773:ALA:HB2	2.48	0.47
1:A:926:ILE:HB	1:A:1014:TYR:HB3	1.97	0.47
1:A:934:LYS:HB3	1:A:1004:GLU:HG2	1.95	0.47
1:A:1124:ILE:HB	1:A:1133:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:1588:ASP:N	1:A:1588:ASP:OD1	2.47	0.47
1:A:1940:PHE:HD2	1:A:1972:LEU:HD12	1.80	0.47
1:A:2718:ILE:HD12	1:A:2719:PRO:HD2	1.96	0.47
1:A:3364:ALA:HB3	1:A:3385:THR:HB	1.97	0.47
1:A:4217:CYS:O	1:A:4221:ILE:HG13	2.14	0.47
1:A:147:LYS:O	1:A:147:LYS:HG3	2.15	0.47
1:A:886:ASN:HB2	1:A:900:GLN:HE22	1.80	0.47
1:A:1409:GLU:OE1	1:A:1421:SER:N	2.48	0.47
1:A:1556:LYS:H	1:A:1577:LYS:HZ1	1.63	0.47
1:A:3213:ASN:O	1:A:3216:LEU:HB3	2.15	0.47
1:A:587:GLU:HA	1:A:590:LYS:HE2	1.97	0.47
1:A:1227:GLY:O	1:A:1231:ILE:HG12	2.15	0.47
1:A:1680:ALA:HB3	1:A:1703:ALA:HB3	1.96	0.47
1:A:1849:ALA:HB3	1:A:1873:ALA:HA	1.95	0.47
1:A:2786:GLU:HG2	1:A:2817:PRO:HB3	1.97	0.47
1:A:3073:ASN:HD21	1:A:3088:GLN:HB2	1.80	0.47
1:A:3111:MET:CE	1:A:3179:LYS:HB2	2.45	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4020:SER:HB3	1:A:4043:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:4087:LYS:HA	1:A:4090:TRP:HE3	1.79	0.47
1:A:231:MET:O	1:A:234:PRO:HD2	2.15	0.47
1:A:1668:GLU:OE2	1:A:1687:ASN:N	2.48	0.47
1:A:1952:HIS:N	1:A:1960:ILE:O	2.40	0.47
1:A:3693:THR:HA	1:A:3698:ARG:HG2	1.97	0.47
1:A:268:LEU:HB2	1:A:269:PRO:HD3	1.97	0.46
1:A:1641:HIS:C	1:A:1642:LYS:HD3	2.35	0.46
1:A:3191:ALA:HA	1:A:3194:CYS:HB2	1.96	0.46
1:A:207:ARG:HH22	1:A:212:CYS:N	2.14	0.46
1:A:337:ILE:O	1:A:339:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:411:VAL:O	1:A:415:VAL:HG22	2.15	0.46
1:A:489:LEU:HD11	1:A:523:ILE:HG23	1.96	0.46
1:A:1476:LYS:N	1:A:1479:LEU:O	2.48	0.46
1:A:2769:PHE:CE2	1:A:2771:LEU:HB2	2.49	0.46
1:A:3334:MET:CE	1:A:3335:GLY:H	2.29	0.46
1:A:3800:TYR:HB2	1:A:3811:PHE:CE2	2.50	0.46
1:A:704:LEU:HD22	1:A:711:PHE:HE2	1.80	0.46
1:A:1176:PHE:HB3	1:A:1285:VAL:HB	1.97	0.46
1:A:1289:LEU:CD2	1:A:1352:LEU:H	2.27	0.46
1:A:1719:LEU:HD12	1:A:4389:PHE:HB3	1.96	0.46
1:A:1774:TYR:HD2	1:A:1779:PHE:HA	1.80	0.46
1:A:2938:ASP:OD1	1:A:2939:GLU:N	2.48	0.46
1:A:3048:ALA:H	1:A:3076:LEU:HB3	1.80	0.46
1:A:3319:ASP:OD1	1:A:3319:ASP:N	2.47	0.46
1:A:3730:PHE:HB2	1:A:3770:ILE:HG22	1.97	0.46
1:A:3948:THR:HA	1:A:3956:ALA:O	2.15	0.46
1:A:144:TYR:CB	1:A:302:GLY:H	2.20	0.46
1:A:267:PHE:CZ	1:A:269:PRO:HD2	2.50	0.46
1:A:427:ARG:NE	1:A:427:ARG:HA	2.30	0.46
1:A:3263:PHE:HE1	1:A:3280:MET:HB2	1.80	0.46
1:A:3925:GLU:HB2	1:A:3952:ARG:CZ	2.46	0.46
1:A:56:TYR:HD1	1:A:286:LEU:HD21	1.79	0.46
1:A:469:TYR:O	1:A:472:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:533:LYS:HD3	1:A:533:LYS:O	2.15	0.46
1:A:660:ILE:HB	1:A:670:GLU:HB2	1.97	0.46
1:A:831:PHE:CD1	1:A:854:ILE:HG23	2.51	0.46
1:A:3708:PHE:CZ	1:A:3883:LEU:HD11	2.51	0.46
1:A:1683:LYS:HD2	1:A:1699:LEU:O	2.15	0.46
1:A:2066:VAL:HA	1:A:2753:PRO:HA	1.97	0.46
1:A:4112:ALA:HB3	1:A:4496:ARG:HH21	1.81	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:341:ASN:HA	1:A:344:ARG:HE	1.80	0.46
1:A:486:TYR:CD1	1:A:526:ALA:HB2	2.51	0.46
1:A:588:GLN:HB3	1:A:633:PHE:CD1	2.50	0.46
1:A:896:ARG:NH2	1:A:946:SER:O	2.49	0.46
1:A:941:THR:HG23	1:A:998:ASP:OD1	2.16	0.46
1:A:1571:LYS:HZ3	1:A:1588:ASP:HB2	1.80	0.46
1:A:2726:LEU:HG	1:A:2728:LEU:HD11	1.97	0.46
1:A:3099:ASN:OD1	1:A:3101:ASN:ND2	2.49	0.46
1:A:3594:TRP:CZ2	1:A:3805:ASP:HB2	2.50	0.46
1:A:140:GLN:HB3	1:A:142:PHE:HE2	1.80	0.46
1:A:235:LEU:O	1:A:239:ILE:HG12	2.15	0.46
1:A:397:TRP:CZ2	1:A:401:VAL:HG11	2.51	0.46
1:A:446:SER:O	1:A:495:MET:HE1	2.15	0.46
1:A:1115:LYS:HG3	1:A:1116:GLU:H	1.81	0.46
1:A:3547:LYS:HE3	1:A:3565:HIS:CE1	2.51	0.46
1:A:3017:PHE:HB3	1:A:3039:PHE:CZ	2.51	0.46
1:A:1304:GLY:HA3	1:A:1344:LYS:NZ	2.31	0.46
1:A:1500:THR:N	1:A:1521:ARG:O	2.47	0.46
1:A:3725:VAL:HG22	1:A:3730:PHE:CD1	2.51	0.46
1:A:3790:LYS:HB2	1:A:3821:THR:HB	1.97	0.46
1:A:3910:GLU:N	1:A:3910:GLU:OE1	2.48	0.46
1:A:3951:HIS:CG	1:A:3952:ARG:H	2.33	0.46
1:A:3953:ASP:OD2	1:A:4088:TYR:OH	2.24	0.46
1:A:399:LYS:HE3	1:A:400:ARG:NH1	2.31	0.45
1:A:928:SER:O	1:A:930:LYS:NZ	2.33	0.45
1:A:2420:LEU:O	1:A:2424:ILE:HG12	2.15	0.45
1:A:2769:PHE:CD1	1:A:2799:SER:HB3	2.51	0.45
1:A:3780:ALA:CB	1:A:3790:LYS:HG2	2.46	0.45
1:A:4367:LEU:HD11	1:A:4422:HIS:CE1	2.51	0.45
1:A:1155:THR:HG22	1:A:1160:THR:HA	1.97	0.45
1:A:3647:GLN:HG3	1:A:3662:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:4021:LYS:HZ2	1:A:4042:GLU:HG2	1.81	0.45
1:A:83:GLU:HB2	1:A:91:ILE:HB	1.98	0.45
1:A:422:SER:OG	1:A:425:GLN:HG2	2.16	0.45
1:A:471:MET:SD	1:A:506:LEU:HG	2.56	0.45
1:A:711:PHE:HB2	1:A:712:PRO:HD3	1.99	0.45
1:A:3153:TRP:CD1	1:A:3159:LYS:HB2	2.51	0.45
1:A:3901:SER:OG	1:A:3912:VAL:HB	2.16	0.45
1:A:399:LYS:HE3	1:A:400:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:592:PHE:HB2	1:A:634:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:1501:TYR:CE2	1:A:1503:LEU:HB2	2.52	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1572:SER:HB2	1:A:1587:MET:SD	2.56	0.45
1:A:1631:LEU:HD13	1:A:1640:ALA:HA	1.98	0.45
1:A:2244:SER:O	1:A:2247:SER:OG	2.17	0.45
1:A:2860:LEU:HB3	1:A:2867:LEU:HB3	1.97	0.45
1:A:2905:ASP:OD1	1:A:2907:ARG:NH1	2.47	0.45
1:A:3100:GLN:HB3	1:A:3102:PHE:HE2	1.81	0.45
1:A:3202:LYS:O	1:A:3205:ASP:HB2	2.15	0.45
1:A:4089:HIS:HE1	1:A:4095:LEU:HB2	1.81	0.45
1:A:658:ASN:O	1:A:671:SER:HA	2.16	0.45
1:A:1049:MET:HG3	1:A:1064:VAL:HG22	1.99	0.45
1:A:1570:LEU:HD12	1:A:1570:LEU:O	2.17	0.45
1:A:4010:GLY:HA3	1:A:4025:TYR:CZ	2.52	0.45
1:A:1289:LEU:HD22	1:A:1352:LEU:N	2.31	0.45
1:A:3291:ARG:HE	1:A:3318:PRO:HB2	1.80	0.45
1:A:3520:TYR:CE2	1:A:3522:ASN:HB2	2.51	0.45
1:A:4068:THR:O	1:A:4071:LYS:HG3	2.16	0.45
1:A:4280:ALA:HA	1:A:4283:VAL:HG12	1.97	0.45
1:A:4394:VAL:O	1:A:4398:VAL:HG22	2.17	0.45
1:A:689:GLU:O	1:A:777:LEU:HD12	2.16	0.45
1:A:891:ILE:HG22	1:A:894:PHE:HD2	1.81	0.45
1:A:1367:TYR:CZ	1:A:1369:TRP:HB2	2.51	0.45
1:A:1506:GLN:HB2	1:A:1515:ASN:HB2	1.99	0.45
1:A:1603:GLN:NE2	1:A:1611:PHE:O	2.49	0.45
1:A:3283:PHE:H	1:A:3292:VAL:HG21	1.82	0.45
1:A:3744:LEU:HB3	1:A:3763:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:4247:GLN:O	1:A:4251:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:4283:VAL:O	1:A:4287:ILE:HG13	2.17	0.45
1:A:119:SER:HA	1:A:122:PHE:HB3	1.99	0.45
1:A:390:CYS:O	1:A:394:ILE:HG12	2.16	0.45
1:A:710:PHE:CG	1:A:761:LEU:HD22	2.52	0.45
1:A:1218:GLN:HE22	1:A:4526:GLN:HG2	1.82	0.45
1:A:2119:PRO:HB2	1:A:2371:LYS:HE3	1.99	0.45
1:A:2153:GLU:HG2	1:A:2331:ALA:HB3	1.99	0.45
1:A:2929:TRP:HZ3	1:A:2942:HIS:HB2	1.81	0.45
1:A:3820:LEU:HB2	1:A:3862:ILE:HB	1.99	0.45
1:A:3946:LYS:HD2	1:A:3958:TYR:O	2.16	0.45
1:A:4046:ARG:NH2	1:A:4053:GLN:OE1	2.49	0.45
1:A:4459:ASP:OD1	1:A:4459:ASP:N	2.50	0.45
1:A:575:ASN:ND2	1:A:579:GLN:HE22	2.15	0.45
1:A:1830:ALA:HB2	1:A:1835:GLU:HG3	1.99	0.45
1:A:2966:LYS:HG3	1:A:2967:HIS:CD2	2.51	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:363:VAL:HA	1:A:366:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:1217:PRO:HG3	1:A:4531:PHE:CE2	2.52	0.45
1:A:2145:LEU:HD23	1:A:2342:HIS:CE1	2.52	0.45
1:A:3060:PHE:HB2	1:A:3064:LEU:HB2	1.98	0.45
1:A:4457:ASP:OD1	1:A:4457:ASP:N	2.46	0.45
1:A:207:ARG:HH22	1:A:211:GLN:C	2.20	0.44
1:A:419:PRO:HB2	1:A:420:GLU:OE1	2.17	0.44
1:A:495:MET:SD	1:A:495:MET:N	2.91	0.44
1:A:1101:ILE:O	1:A:1103:GLU:HG3	2.17	0.44
1:A:2764:ILE:N	1:A:2771:LEU:O	2.45	0.44
1:A:2799:SER:O	1:A:2805:ASN:ND2	2.49	0.44
1:A:2884:ASP:HB2	1:A:2911:LYS:HD3	1.99	0.44
1:A:2948:PHE:HD1	1:A:2957:PHE:HD1	1.65	0.44
1:A:3258:VAL:HG13	1:A:3285:ILE:HG22	1.99	0.44
1:A:3291:ARG:HB3	1:A:3320:PHE:HD1	1.82	0.44
1:A:3562:LEU:HD13	1:A:3588:THR:HG22	1.99	0.44
1:A:3918:SER:CA	1:A:3925:GLU:HG2	2.36	0.44
1:A:4036:LEU:HB3	1:A:4062:ALA:HB2	1.99	0.44
1:A:73:ALA:HB3	1:A:102:VAL:HG21	1.99	0.44
1:A:141:VAL:O	1:A:307:GLY:HA2	2.18	0.44
1:A:253:ARG:HB2	1:A:255:HIS:ND1	2.33	0.44
1:A:1599:ARG:HD2	1:A:1600:SER:N	2.31	0.44
1:A:2969:ARG:HB2	1:A:2993:ASP:HB2	2.00	0.44
1:A:4262:LEU:O	1:A:4266:ILE:HG12	2.17	0.44
1:A:4341:ILE:HB	1:A:4342:PRO:HD3	1.98	0.44
1:A:120:GLU:O	1:A:123:ALA:HB3	2.17	0.44
1:A:576:LYS:O	1:A:580:ILE:HG12	2.17	0.44
1:A:902:ASN:ND2	1:A:943:HIS:HD2	2.15	0.44
1:A:902:ASN:HB2	1:A:941:THR:O	2.16	0.44
1:A:3343:PHE:CE2	1:A:3345:SER:HB3	2.53	0.44
1:A:3682:LYS:HD2	1:A:3687:PHE:HD1	1.81	0.44
1:A:4474:GLN:O	1:A:4478:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:4540:LYS:HE2	1:A:4554:LEU:HD23	2.00	0.44
1:A:486:TYR:CE1	1:A:526:ALA:HB2	2.52	0.44
1:A:1010:GLU:O	1:A:1042:ALA:N	2.50	0.44
1:A:1571:LYS:NZ	1:A:1588:ASP:HB2	2.32	0.44
1:A:3685:TRP:CG	1:A:3695:SER:HA	2.53	0.44
1:A:106:ASN:N	1:A:110:LYS:O	2.40	0.44
1:A:1480:PHE:HE2	1:A:1509:PRO:HG3	1.82	0.44
1:A:1906:THR:OG1	1:A:1934:LYS:NZ	2.37	0.44
1:A:2869:LEU:HA	1:A:2888:LYS:O	2.18	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3953:ASP:C	1:A:3981:PRO:HD2	2.37	0.44
1:A:3958:TYR:CD2	1:A:3976:LEU:HB3	2.51	0.44
1:A:209:LEU:HD11	1:A:263:GLU:OE1	2.18	0.44
1:A:692:LEU:HD13	1:A:775:ALA:HB2	1.99	0.44
1:A:1061:SER:OG	1:A:1063:GLU:OE2	2.20	0.44
1:A:1123:VAL:HG13	1:A:1134:ARG:NH1	2.33	0.44
1:A:3170:ASP:HB2	1:A:3344:LYS:HB3	1.99	0.44
1:A:3185:SER:HB3	1:A:3328:HIS:HB3	2.00	0.44
1:A:3497:LYS:HA	1:A:3513:ILE:O	2.16	0.44
1:A:4116:TYR:CD1	1:A:4488:ILE:HG22	2.53	0.44
1:A:593:VAL:O	1:A:597:ILE:HG12	2.18	0.44
1:A:600:ILE:HA	1:A:608:ILE:HD11	2.00	0.44
1:A:2025:LYS:HE3	1:A:2032:GLU:HG2	1.99	0.44
1:A:2067:HIS:HB3	1:A:2752:VAL:O	2.18	0.44
1:A:2624:LEU:HD12	1:A:2648:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:2795:ALA:N	1:A:2808:PHE:O	2.41	0.44
1:A:3067:LYS:HB2	1:A:3092:ARG:HH12	1.83	0.44
1:A:3547:LYS:HE3	1:A:3565:HIS:NE2	2.32	0.44
1:A:341:ASN:OD1	1:A:344:ARG:HD2	2.17	0.44
1:A:375:SER:HB3	1:A:376:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:1172:GLU:O	1:A:1173:LYS:HE2	2.18	0.44
1:A:3115:VAL:HG12	1:A:3117:ILE:HG12	1.99	0.44
1:A:4006:VAL:HG12	1:A:4026:TYR:HE1	1.82	0.44
1:A:52:TYR:HB2	1:A:82:LEU:HB3	1.99	0.44
1:A:135:ILE:O	1:A:135:ILE:HG23	2.18	0.44
1:A:1134:ARG:HB2	1:A:1153:SER:H	1.82	0.44
1:A:1390:HIS:NE2	1:A:1392:LYS:HB2	2.33	0.44
1:A:1592:SER:OG	1:A:1593:LYS:N	2.51	0.44
1:A:1702:LYS:O	1:A:1708:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:2536:LEU:HD22	1:A:2636:LEU:HB3	2.00	0.44
1:A:2903:GLN:HB3	1:A:2930:LYS:HG3	2.00	0.44
1:A:3479:HIS:ND1	1:A:3495:SER:O	2.49	0.44
1:A:3567:THR:C	1:A:3568:LYS:HD3	2.38	0.44
1:A:89:SER:HB2	1:A:299:PHE:CD1	2.53	0.43
1:A:207:ARG:NH2	1:A:211:GLN:HB2	2.33	0.43
1:A:1171:GLU:HG2	1:A:1295:LYS:HZ2	1.83	0.43
1:A:1691:ARG:NE	1:A:4392:SER:HG	2.11	0.43
1:A:1693:HIS:HB3	1:A:1718:ILE:HD13	2.00	0.43
1:A:3085:ALA:N	1:A:3104:ALA:O	2.37	0.43
1:A:3712:LYS:HB2	1:A:3878:PRO:CB	2.46	0.43
1:A:4126:ILE:HA	1:A:4129:ARG:HG2	1.99	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:161:ILE:O	1:A:165:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:486:TYR:OH	1:A:774:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:874:VAL:HA	1:A:876:LYS:HZ2	1.82	0.43
1:A:1123:VAL:HG13	1:A:1134:ARG:HH12	1.83	0.43
1:A:1968:VAL:HG13	1:A:1981:TRP:CD1	2.53	0.43
1:A:2192:HIS:HB2	1:A:2294:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:2846:PHE:N	1:A:2849:ALA:O	2.51	0.43
1:A:4087:LYS:HA	1:A:4090:TRP:CE3	2.54	0.43
1:A:4302:LEU:O	1:A:4306:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:4532:LEU:HA	1:A:4535:ILE:HG12	2.00	0.43
1:A:762:ILE:HG21	1:A:2208:LYS:HB3	2.00	0.43
1:A:774:ARG:HH11	1:A:776:TYR:HB3	1.83	0.43
1:A:795:LEU:O	1:A:798:LEU:HG	2.18	0.43
1:A:1205:HIS:CE1	1:A:1262:ASN:HD21	2.36	0.43
1:A:1576:GLY:C	1:A:1577:LYS:HD3	2.39	0.43
1:A:500:GLU:OE2	1:A:534:MET:HB3	2.17	0.43
1:A:869:MET:HB3	1:A:917:LEU:HB3	2.00	0.43
1:A:1683:LYS:NZ	1:A:1684:LEU:O	2.45	0.43
1:A:1775:SER:N	1:A:1778:LYS:O	2.40	0.43
1:A:2116:GLY:HA2	1:A:2374:ILE:HG21	1.99	0.43
1:A:3564:GLU:OE2	1:A:3566:SER:HB2	2.19	0.43
1:A:3685:TRP:HB3	1:A:3694:THR:HG22	2.00	0.43
1:A:4145:LYS:HE3	1:A:4463:LYS:HG3	2.01	0.43
1:A:57:GLU:N	1:A:57:GLU:OE1	2.51	0.43
1:A:123:ALA:HA	1:A:126:MET:SD	2.58	0.43
1:A:131:LEU:HD11	1:A:143:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:565:LEU:HD23	1:A:569:PRO:HB3	2.01	0.43
1:A:1697:PHE:HD1	1:A:1714:TYR:HB2	1.83	0.43
1:A:1940:PHE:CD2	1:A:1972:LEU:HD12	2.52	0.43
1:A:2825:LYS:HA	1:A:2842:GLU:HA	2.00	0.43
1:A:3067:LYS:N	1:A:3094:ASN:OD1	2.47	0.43
1:A:3550:PHE:HB2	1:A:3563:TRP:HA	1.99	0.43
1:A:4021:LYS:HZ2	1:A:4040:LYS:HD3	1.84	0.43
1:A:4021:LYS:NZ	1:A:4040:LYS:HD3	2.34	0.43
1:A:4031:SER:OG	1:A:4033:ASP:OD1	2.37	0.43
1:A:1554:ILE:O	1:A:1577:LYS:HE2	2.18	0.43
1:A:1756:SER:HB2	1:A:1767:SER:HB3	2.00	0.43
1:A:2984:SER:HB3	1:A:3008:ALA:HB3	2.00	0.43
1:A:209:LEU:HD12	1:A:241:SER:HB2	2.00	0.43
1:A:889:ILE:O	1:A:890:ILE:HD13	2.18	0.43
1:A:912:GLU:HB3	1:A:927:PRO:HG2	1.99	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1171:GLU:HA	1:A:1293:SER:HB2	2.01	0.43
1:A:1476:LYS:O	1:A:1478:HIS:N	2.51	0.43
1:A:1573:ASP:OD2	1:A:1575:ASN:ND2	2.51	0.43
1:A:2375:GLN:NE2	1:A:2376:LYS:HG3	2.33	0.43
1:A:2946:ILE:HA	1:A:2959:LEU:HD13	2.01	0.43
1:A:3632:ARG:NH1	1:A:3633:TRP:O	2.52	0.43
1:A:3903:LYS:HB3	1:A:3905:LYS:NZ	2.33	0.43
1:A:3984:THR:HB	1:A:4004:PRO:HG2	2.00	0.43
1:A:4119:ALA:O	1:A:4123:ILE:HG12	2.18	0.43
1:A:531:LEU:HD23	1:A:534:MET:SD	2.58	0.43
1:A:1586:LYS:NZ	1:A:1588:ASP:HB3	2.34	0.43
1:A:1802:LYS:NZ	1:A:1807:ASP:OD2	2.52	0.43
1:A:1889:SER:O	1:A:1916:LYS:N	2.44	0.43
1:A:2798:GLU:OE2	1:A:2798:GLU:N	2.38	0.43
1:A:1914:ASN:HD21	1:A:1916:LYS:HE2	1.82	0.43
1:A:1933:LEU:HD11	1:A:1940:PHE:HZ	1.83	0.43
1:A:1956:SER:C	1:A:1957:ARG:HD3	2.40	0.43
1:A:1986:GLN:HG3	1:A:1991:GLU:HB2	2.01	0.43
1:A:2036:ILE:HG23	1:A:2800:LYS:HE3	2.00	0.43
1:A:342:ILE:H	1:A:342:ILE:HD12	1.83	0.43
1:A:1431:LEU:HD11	1:A:1457:ALA:HB1	2.01	0.43
1:A:1877:SER:OG	1:A:1878:ALA:N	2.52	0.43
1:A:3132:ILE:N	1:A:3147:LEU:O	2.46	0.43
1:A:46:PHE:HE1	1:A:87:LEU:HA	1.83	0.42
1:A:369:GLN:O	1:A:373:VAL:HG22	2.19	0.42
1:A:1197:LEU:HB3	1:A:1200:TYR:HB2	2.01	0.42
1:A:1426:LEU:HB2	1:A:1433:SER:HB3	2.01	0.42
1:A:1595:ASN:ND2	1:A:1618:SER:OG	2.43	0.42
1:A:1907:ILE:HB	1:A:1933:LEU:HB3	1.99	0.42
1:A:2186:LYS:HE3	1:A:2302:GLY:HA3	2.00	0.42
1:A:2943:GLU:HB2	1:A:2962:LYS:HB3	2.01	0.42
1:A:3176:GLN:O	1:A:3338:THR:OG1	2.35	0.42
1:A:3630:LYS:NZ	1:A:3653:ASP:HB3	2.34	0.42
1:A:3810:PHE:HD1	1:A:3872:PRO:HA	1.84	0.42
1:A:4070:LEU:O	1:A:4074:VAL:HG23	2.18	0.42
1:A:1993:SER:HB3	1:A:2012:ARG:HH21	1.85	0.42
1:A:2370:LEU:O	1:A:2374:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:2459:LEU:HB2	1:A:2460:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:2859:SER:HA	1:A:2868:GLU:HA	2.00	0.42
1:A:2922:THR:OG1	1:A:2945:GLN:NE2	2.51	0.42
1:A:2962:LYS:NZ	1:A:2964:ASN:HB3	2.34	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3425:VAL:O	1:A:3443:GLU:HA	2.19	0.42
1:A:3584:THR:OG1	1:A:3602:VAL:HG12	2.19	0.42
1:A:3674:ASN:HA	1:A:3685:TRP:CZ3	2.54	0.42
1:A:41:LYS:O	1:A:44:THR:OG1	2.29	0.42
1:A:49:LEU:HB3	1:A:294:ILE:O	2.19	0.42
1:A:395:LEU:HB3	1:A:432:MET:CE	2.48	0.42
1:A:1946:TYR:C	1:A:1947:LYS:HD3	2.40	0.42
1:A:3291:ARG:HB3	1:A:3320:PHE:CD1	2.54	0.42
1:A:329:LEU:HD11	1:A:333:LYS:HE2	2.02	0.42
1:A:2250:GLN:O	1:A:2253:ASP:HB2	2.19	0.42
1:A:2463:ALA:HB2	1:A:2716:ILE:HG12	2.01	0.42
1:A:3067:LYS:HB2	1:A:3094:ASN:HA	2.02	0.42
1:A:3532:LEU:HB2	1:A:3548:GLU:CB	2.49	0.42
1:A:3544:LEU:HD22	1:A:3569:ASN:HB2	2.01	0.42
1:A:3673:LYS:NZ	1:A:3694:THR:HA	2.34	0.42
1:A:3955:SER:O	1:A:3978:ILE:HD12	2.20	0.42
1:A:4058:TRP:CE2	1:A:4557:GLY:HA2	2.55	0.42
1:A:4441:GLU:O	1:A:4444:LEU:HB3	2.19	0.42
1:A:240:SER:O	1:A:265:HIS:ND1	2.51	0.42
1:A:379:LEU:O	1:A:383:VAL:HG22	2.20	0.42
1:A:665:ASN:HD21	1:A:698:GLU:HA	1.85	0.42
1:A:1122:GLY:N	1:A:1135:SER:O	2.51	0.42
1:A:1595:ASN:ND2	1:A:1619:LEU:O	2.52	0.42
1:A:4183:HIS:CE1	1:A:4304:GLN:HG2	2.54	0.42
1:A:61:SER:HB2	1:A:71:ARG:HD2	2.00	0.42
1:A:352:VAL:O	1:A:355:LEU:HB3	2.20	0.42
1:A:575:ASN:HA	1:A:618:ALA:HB1	2.02	0.42
1:A:655:ILE:HD13	1:A:675:THR:HB	2.02	0.42
1:A:916:ALA:HB3	1:A:923:LYS:HE2	2.01	0.42
1:A:1121:LYS:HA	1:A:1136:GLU:HA	2.01	0.42
1:A:1373:TYR:CD1	1:A:1389:TYR:HB3	2.54	0.42
1:A:4127:ASP:OD2	1:A:4478:LYS:NZ	2.38	0.42
1:A:86:GLN:HB2	1:A:89:SER:OG	2.20	0.42
1:A:106:ASN:HB2	1:A:110:LYS:HB2	2.01	0.42
1:A:326:LEU:HD11	1:A:370:LEU:HD22	2.02	0.42
1:A:993:TYR:N	1:A:994:PRO:HD2	2.34	0.42
1:A:1668:GLU:OE1	1:A:1668:GLU:N	2.52	0.42
1:A:2005:ILE:CG2	1:A:2060:TYR:HB3	2.50	0.42
1:A:2194:LEU:O	1:A:2198:ILE:HG13	2.20	0.42
1:A:2757:LYS:HZ3	1:A:2759:TYR:HB3	1.83	0.42
1:A:2969:ARG:NH1	1:A:2995:GLN:OE1	2.39	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3618:GLN:NE2	1:A:3635:ASN:HB3	2.35	0.42
1:A:4071:LYS:HB3	1:A:4521:ILE:HD13	2.01	0.42
1:A:209:LEU:HG	1:A:242:SER:HA	2.01	0.42
1:A:673:LEU:HG	1:A:690:ILE:HB	2.02	0.42
1:A:1855:THR:O	1:A:1867:ARG:NH2	2.48	0.42
1:A:1999:TYR:HB2	1:A:2059:LYS:HE2	2.01	0.42
1:A:2000:ASN:HA	1:A:2005:ILE:HG13	2.01	0.42
1:A:2055:VAL:HB	1:A:2763:LYS:HG3	2.02	0.42
1:A:2145:LEU:HD11	1:A:2338:ARG:HD2	2.02	0.42
1:A:2763:LYS:CG	1:A:2765:GLN:HE22	2.32	0.42
1:A:3710:TYR:HE2	1:A:3712:LYS:HB3	1.83	0.42
1:A:3803:PRO:HB2	1:A:3806:SER:HB3	2.02	0.42
1:A:324:ALA:HA	1:A:327:LYS:HG2	2.02	0.42
1:A:1014:TYR:OH	1:A:1037:THR:O	2.30	0.42
1:A:1766:PHE:HB3	1:A:1786:LEU:HB2	2.01	0.42
1:A:2418:LYS:HE3	1:A:2418:LYS:HB3	1.81	0.42
1:A:2759:TYR:CD2	1:A:2761:ILE:HG13	2.54	0.42
1:A:2808:PHE:CZ	1:A:2810:ALA:HB2	2.55	0.42
1:A:4024:PHE:O	1:A:4038:ILE:N	2.53	0.42
1:A:4186:VAL:O	1:A:4190:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:176:VAL:HB	1:A:189:HIS:ND1	2.35	0.42
1:A:331:GLU:O	1:A:335:LEU:N	2.49	0.42
1:A:1613:SER:HA	1:A:1630:ILE:HA	2.01	0.42
1:A:1977:GLN:OE1	1:A:2000:ASN:ND2	2.53	0.42
1:A:2543:TYR:CE2	1:A:2610:ALA:HB2	2.54	0.42
1:A:2572:ASP:OD1	1:A:2572:ASP:N	2.50	0.42
1:A:2771:LEU:HD12	1:A:2796:LYS:O	2.20	0.42
1:A:3451:LYS:HE2	1:A:3451:LYS:HB2	1.87	0.42
1:A:3585:SER:HB3	1:A:3601:GLN:HG3	2.01	0.42
1:A:3824:GLN:HE21	1:A:3856:ILE:HG23	1.85	0.42
1:A:4013:MET:HG3	1:A:4022:TRP:CD1	2.55	0.42
1:A:174:LYS:HD2	1:A:189:HIS:ND1	2.35	0.41
1:A:408:ILE:HA	1:A:411:VAL:HG12	2.02	0.41
1:A:822:LYS:HA	1:A:861:GLY:HA3	2.01	0.41
1:A:1707:GLU:HG3	1:A:1731:VAL:O	2.20	0.41
1:A:3462:TYR:HE1	1:A:3477:VAL:HG23	1.85	0.41
1:A:924:PHE:O	1:A:1015:SER:HA	2.20	0.41
1:A:1625:GLU:OE1	1:A:1625:GLU:N	2.50	0.41
1:A:4006:VAL:HG12	1:A:4026:TYR:CE1	2.55	0.41
1:A:4484:THR:O	1:A:4488:ILE:HG13	2.20	0.41
1:A:4555:ALA:O	1:A:4557:GLY:N	2.53	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:490:ARG:HH11	1:A:783:GLU:CD	2.23	0.41
1:A:509:SER:HA	1:A:512:LYS:HG2	2.02	0.41
1:A:905:PHE:HA	1:A:937:SER:O	2.21	0.41
1:A:1357:ASP:HA	1:A:1374:SER:HA	2.02	0.41
1:A:1418:PHE:CZ	1:A:1420:LEU:HB2	2.55	0.41
1:A:1634:ASP:OD2	1:A:1635:LYS:HG2	2.21	0.41
1:A:1833:ASN:OD1	1:A:1834:ASN:N	2.53	0.41
1:A:2493:ILE:HG13	1:A:2689:PRO:HG3	2.01	0.41
1:A:2806:PHE:HA	1:A:2831:SER:O	2.20	0.41
1:A:2892:LYS:NZ	1:A:2894:ASN:HB2	2.35	0.41
1:A:3381:LEU:HD13	1:A:3401:LEU:HD13	2.01	0.41
1:A:3578:PHE:CE2	1:A:3580:ASN:HB3	2.55	0.41
1:A:3668:HIS:O	1:A:3670:ARG:HG2	2.21	0.41
1:A:394:ILE:O	1:A:398:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:443:TYR:CE1	1:A:783:GLU:HB2	2.55	0.41
1:A:748:GLN:O	1:A:752:ASN:HB2	2.20	0.41
1:A:2055:VAL:HB	1:A:2763:LYS:CG	2.50	0.41
1:A:2362:VAL:HG13	1:A:2366:HIS:CE1	2.55	0.41
1:A:2884:ASP:HA	1:A:2910:ILE:O	2.20	0.41
1:A:2971:ASN:HB3	1:A:2991:GLN:HB2	2.01	0.41
1:A:3019:GLY:HA3	1:A:3037:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:3088:GLN:OE1	1:A:3101:ASN:HA	2.20	0.41
1:A:3441:LYS:HB3	1:A:3459:GLU:HB2	2.01	0.41
1:A:3723:VAL:HG21	1:A:3811:PHE:CZ	2.50	0.41
1:A:79:LYS:HE3	1:A:79:LYS:HB3	1.92	0.41
1:A:207:ARG:HD3	1:A:208:ASP:O	2.21	0.41
1:A:332:LEU:HD21	1:A:347:LEU:CD1	2.48	0.41
1:A:1167:TRP:HD1	1:A:1176:PHE:HB2	1.86	0.41
1:A:1251:LEU:O	1:A:1255:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:1665:LEU:HD12	1:A:1689:ARG:O	2.20	0.41
1:A:2006:GLY:HA3	1:A:2059:LYS:HD3	2.03	0.41
1:A:2862:THR:OG1	1:A:2863:GLU:N	2.53	0.41
1:A:2918:HIS:NE2	1:A:2920:ALA:HB2	2.35	0.41
1:A:3776:THR:O	1:A:3793:GLU:HA	2.20	0.41
1:A:3954:PHE:CD2	1:A:3978:ILE:HD11	2.56	0.41
1:A:3970:TRP:HE3	1:A:3992:LYS:HD3	1.85	0.41
1:A:216:LYS:O	1:A:838:LEU:HD11	2.21	0.41
1:A:838:LEU:HB2	1:A:846:LEU:CD1	2.44	0.41
1:A:960:ARG:HA	1:A:960:ARG:HD2	1.87	0.41
1:A:1000:ARG:HG3	1:A:1002:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:1693:HIS:HB3	1:A:1718:ILE:CD1	2.51	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2093:GLU:HB3	1:A:2097:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:3772:LYS:HG3	1:A:3798:THR:O	2.20	0.41
1:A:3921:VAL:HB	1:A:3924:LEU:HG	2.01	0.41
1:A:4116:TYR:O	1:A:4120:ILE:HG12	2.21	0.41
1:A:319:PRO:HD2	1:A:320:LYS:NZ	2.35	0.41
1:A:349:ASN:HA	1:A:352:VAL:HG22	2.02	0.41
1:A:821:SER:OG	1:A:822:LYS:N	2.53	0.41
1:A:1726:ILE:N	1:A:1741:ASP:O	2.54	0.41
1:A:2439:THR:O	1:A:2443:ILE:HG12	2.20	0.41
1:A:2528:ILE:HG21	1:A:2665:PHE:HB3	2.02	0.41
1:A:3025:LEU:HD22	1:A:3056:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:3085:ALA:HB3	1:A:3104:ALA:HB3	2.03	0.41
1:A:758:VAL:O	1:A:762:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:1066:ILE:N	1:A:1071:VAL:O	2.41	0.41
1:A:1186:THR:HB	1:A:1275:GLU:HA	2.02	0.41
1:A:2067:HIS:HB2	1:A:2754:THR:HG23	2.03	0.41
1:A:2826:GLU:N	1:A:2841:SER:O	2.53	0.41
1:A:3519:THR:HG23	1:A:3528:SER:OG	2.20	0.41
1:A:4443:PHE:CD1	1:A:4446:ARG:HD2	2.55	0.41
1:A:1287:TYR:HD1	1:A:1356:LEU:HD11	1.85	0.41
1:A:1742:MET:O	1:A:1743:MET:HE2	2.20	0.41
1:A:1984:LYS:NZ	1:A:1995:ASP:OD1	2.38	0.41
1:A:2199:ALA:O	1:A:2202:ILE:HB	2.21	0.41
1:A:2205:ILE:O	1:A:2209:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:2208:LYS:HA	1:A:2208:LYS:HD3	1.92	0.41
1:A:2417:ASN:O	1:A:2420:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:2584:GLY:HA3	1:A:2602:VAL:O	2.21	0.41
1:A:2640:LYS:HE2	1:A:2640:LYS:HB3	1.88	0.41
1:A:3223:TYR:CE1	1:A:3306:VAL:HA	2.52	0.41
1:A:3429:THR:HB	1:A:3440:PHE:CZ	2.56	0.41
1:A:3655:GLU:HG3	1:A:3656:LYS:HG3	2.02	0.41
1:A:3680:TYR:HB3	1:A:3682:LYS:HZ3	1.86	0.41
1:A:3680:TYR:HB3	1:A:3682:LYS:NZ	2.36	0.41
1:A:3810:PHE:CD1	1:A:3872:PRO:HA	2.56	0.41
1:A:3815:VAL:O	1:A:3866:SER:HA	2.21	0.41
1:A:3946:LYS:HZ1	1:A:3957:GLU:C	2.24	0.41
1:A:3979:LYS:HE2	1:A:3979:LYS:HB2	1.78	0.41
1:A:4064:SER:HB2	1:A:4529:HIS:CE1	2.56	0.41
1:A:4067:LEU:HD13	1:A:4525:ILE:HG12	2.03	0.41
1:A:4488:ILE:HA	1:A:4491:TYR:CD1	2.56	0.41
1:A:185:ASN:OD1	1:A:213:ASP:HB2	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:914:HIS:CD2	1:A:927:PRO:HG3	2.56	0.41
1:A:1370:SER:HB3	1:A:1392:LYS:HE3	2.03	0.41
1:A:1625:GLU:H	1:A:1625:GLU:CD	2.24	0.41
1:A:1660:LEU:HD21	1:A:1667:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:1765:ASP:HA	1:A:1787:GLN:OE1	2.21	0.41
1:A:3100:GLN:HB3	1:A:3102:PHE:CE2	2.56	0.41
1:A:3925:GLU:N	1:A:3951:HIS:HE1	2.19	0.41
1:A:1522:PHE:N	1:A:1529:GLY:O	2.34	0.40
1:A:2154:ASN:O	1:A:2158:ILE:HG13	2.21	0.40
1:A:2447:THR:O	1:A:2450:LEU:HG	2.21	0.40
1:A:2791:ALA:O	1:A:2812:ALA:N	2.54	0.40
1:A:3650:LEU:HD12	1:A:3659:LEU:HD11	2.02	0.40
1:A:1751:PHE:HB3	1:A:1753:HIS:CD2	2.56	0.40
1:A:1751:PHE:HB3	1:A:1753:HIS:NE2	2.36	0.40
1:A:2823:ALA:O	1:A:2825:LYS:NZ	2.46	0.40
1:A:3459:GLU:HG3	1:A:3478:ASP:OD1	2.20	0.40
1:A:3608:SER:OG	1:A:3609:SER:N	2.52	0.40
1:A:4116:TYR:CE1	1:A:4488:ILE:HG22	2.57	0.40
1:A:97:CYS:HB3	1:A:122:PHE:HE2	1.86	0.40
1:A:757:SER:O	1:A:760:LYS:HG2	2.22	0.40
1:A:1025:GLU:O	1:A:1028:ALA:N	2.48	0.40
1:A:2046:VAL:HG23	1:A:2047:GLU:HG3	2.03	0.40
1:A:2103:ASN:HB3	1:A:2105:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:2794:THR:HA	1:A:2809:GLN:HA	2.03	0.40
1:A:2825:LYS:HB2	1:A:2842:GLU:HG3	2.03	0.40
1:A:3592:SER:OG	1:A:3595:GLN:HB3	2.22	0.40
1:A:4204:PHE:HE2	1:A:4216:LEU:HD21	1.86	0.40
1:A:4228:LEU:HD13	1:A:4281:GLN:HA	2.04	0.40
1:A:64:VAL:HG12	1:A:66:GLY:N	2.35	0.40
1:A:325:VAL:HG22	1:A:351:LEU:CD1	2.52	0.40
1:A:427:ARG:HH11	1:A:427:ARG:HG2	1.86	0.40
1:A:1087:LYS:HG3	1:A:1113:ASP:OD1	2.21	0.40
1:A:1418:PHE:O	1:A:1440:VAL:HG13	2.22	0.40
1:A:2531:GLU:HG3	1:A:2534:ARG:HH21	1.87	0.40
1:A:3567:THR:HA	1:A:3583:HIS:CG	2.56	0.40
1:A:3587:ALA:HB1	1:A:3600:VAL:HG13	2.02	0.40
1:A:329:LEU:HD12	1:A:332:LEU:HB2	2.03	0.40
1:A:677:LEU:HB3	1:A:687:LEU:CD2	2.49	0.40
1:A:906:PHE:C	1:A:934:LYS:HZ2	2.21	0.40
1:A:1020:TYR:HB2	1:A:1033:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:2197:ALA:O	1:A:2200:ASN:HB3	2.22	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3233:TYR:HD2	1:A:3235:ALA:HB2	1.86	0.40
1:A:3965:GLU:O	1:A:3969:GLU:CB	2.59	0.40
1:A:3986:LEU:HD12	1:A:4002:ALA:O	2.22	0.40
1:A:4101:SER:O	1:A:4105:ARG:HG2	2.21	0.40
1:A:4297:ARG:NH1	1:A:4300:GLN:OE1	2.54	0.40
1:A:4339:ASP:O	1:A:4342:PRO:HD2	2.22	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	4524/4563 (99%)	4297 (95%)	219 (5%)	8 (0%)	44	78

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

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

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	4051/4080 (99%)	4041 (100%)	10 (0%)	92 94

All (10) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	216	LYS
1	A	233	ARG
1	A	695	LYS
1	A	934	LYS
1	A	1215	ARG
1	A	1521	ARG
1	A	1957	ARG
1	A	3389	ARG
1	A	3638	ARG
1	A	4071	LYS

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (21) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	264	GLN
1	A	450	ASN
1	A	579	GLN
1	A	638	GLN
1	A	665	ASN
1	A	870	GLN
1	A	943	HIS
1	A	968	GLN
1	A	1218	GLN
1	A	1532	GLN
1	A	1772	ASN
1	A	1838	HIS
1	A	2765	GLN
1	A	3207	HIS
1	A	3442	GLN
1	A	3533	GLN
1	A	3645	GLN
1	A	3824	GLN
1	A	3987	HIS
1	A	4142	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4526	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

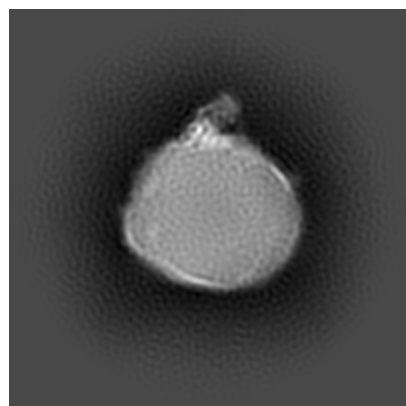
6 Map visualisation [i](#)

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

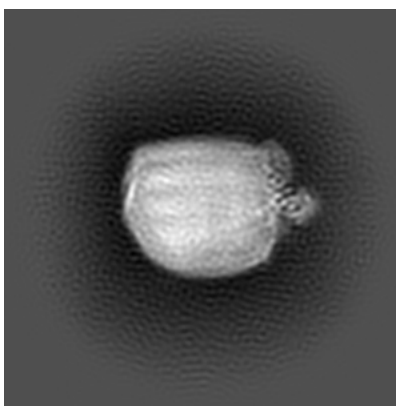
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

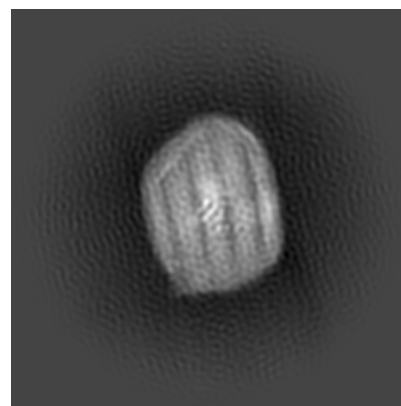
6.1.1 Primary map



X

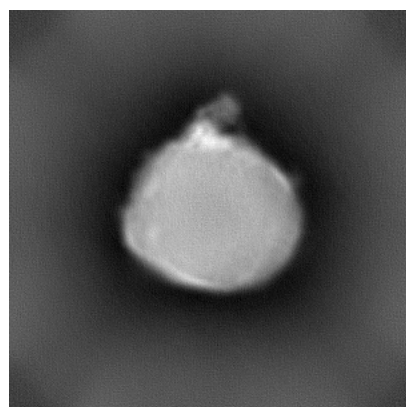


Y

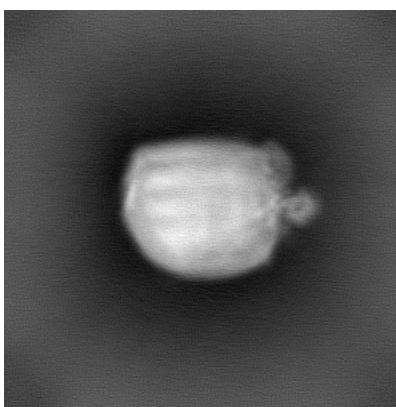


Z

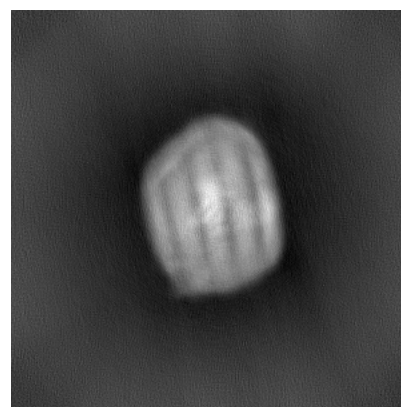
6.1.2 Raw map



X



Y

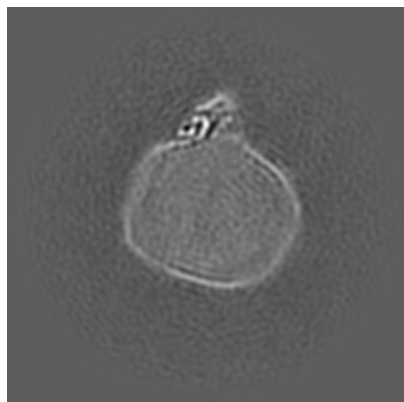


Z

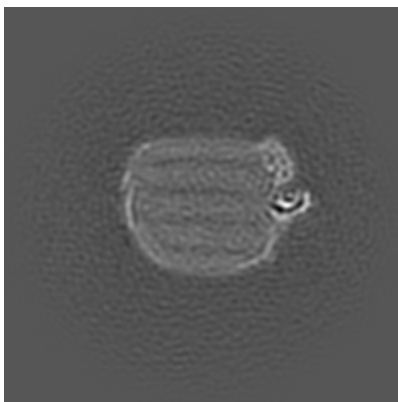
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

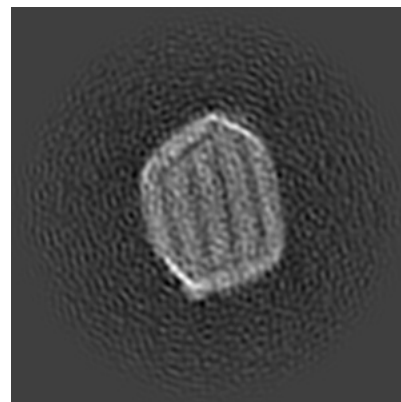
6.2.1 Primary map



X Index: 225

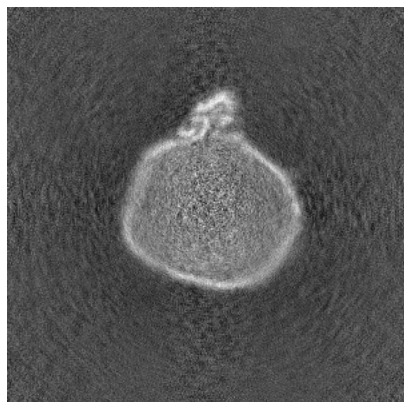


Y Index: 225

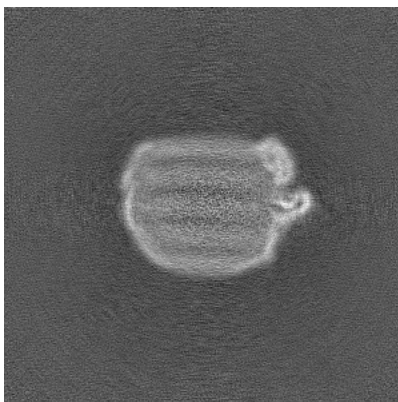


Z Index: 225

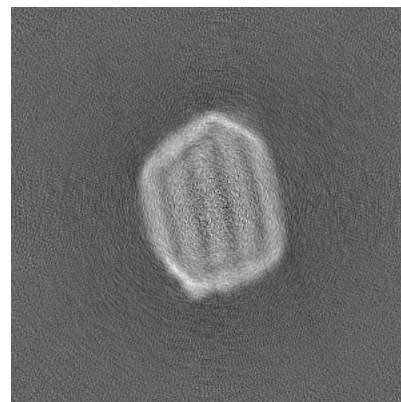
6.2.2 Raw map



X Index: 225



Y Index: 225

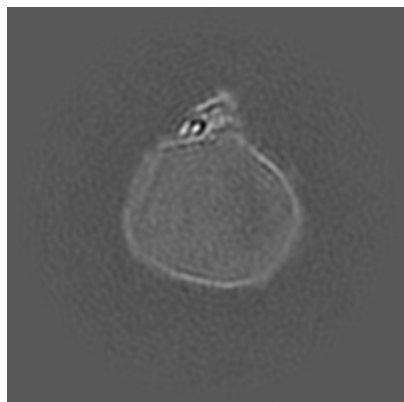


Z Index: 225

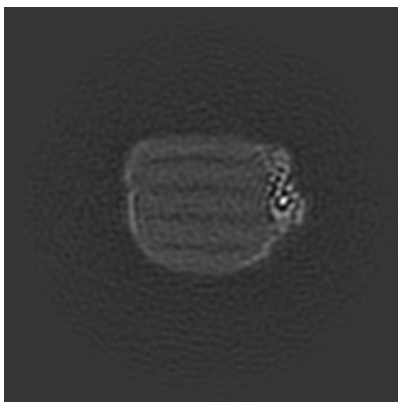
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

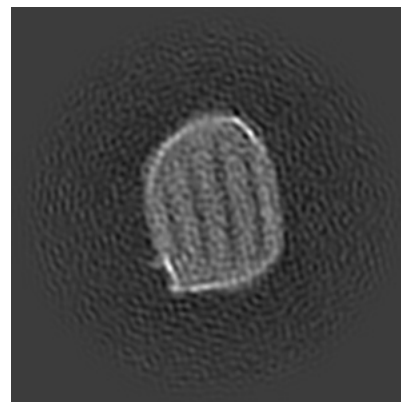
6.3.1 Primary map



X Index: 230

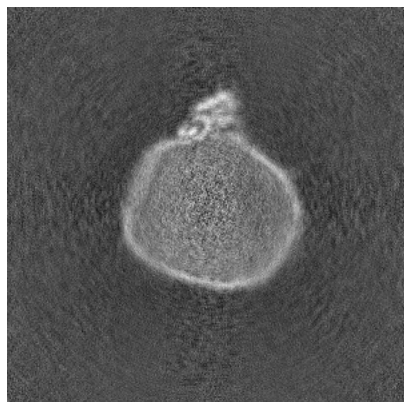


Y Index: 213

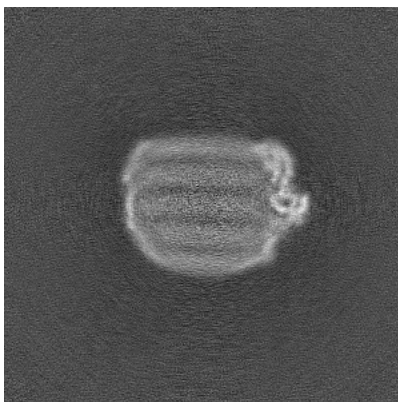


Z Index: 196

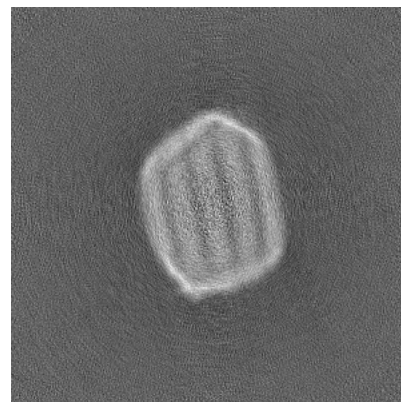
6.3.2 Raw map



X Index: 227



Y Index: 219

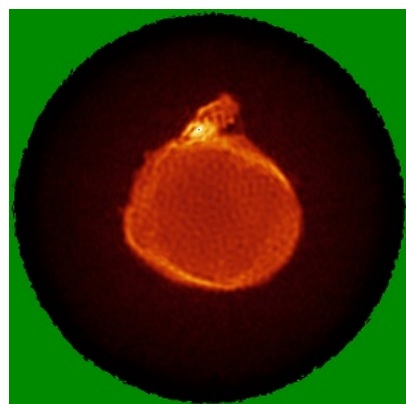


Z Index: 219

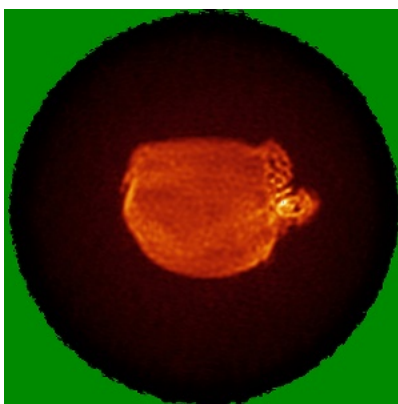
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

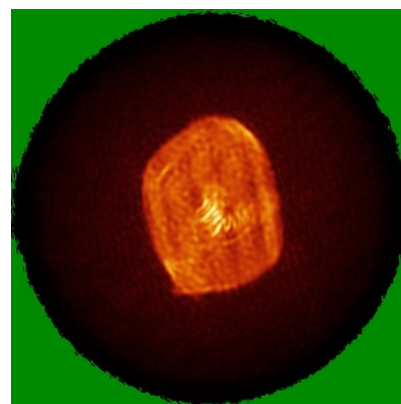
6.4.1 Primary map



X

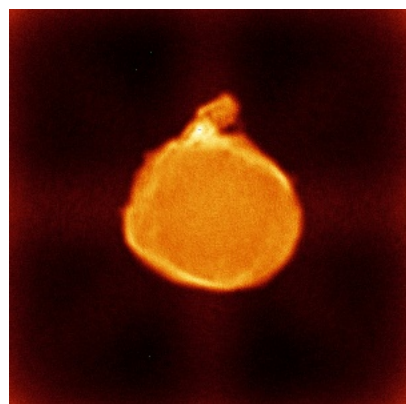


Y

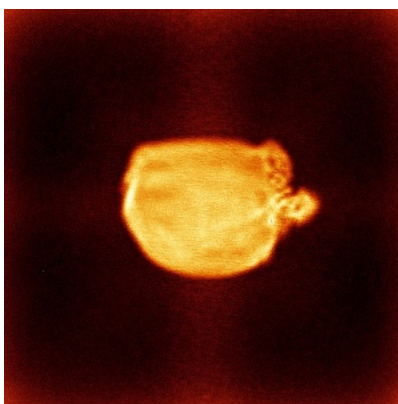


Z

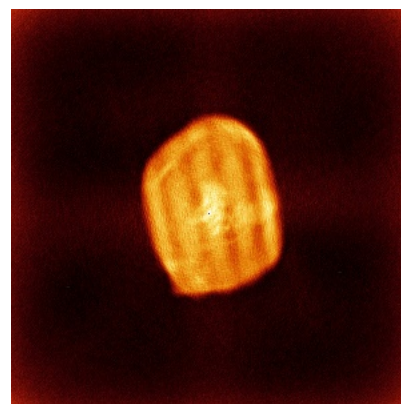
6.4.2 Raw map



X



Y

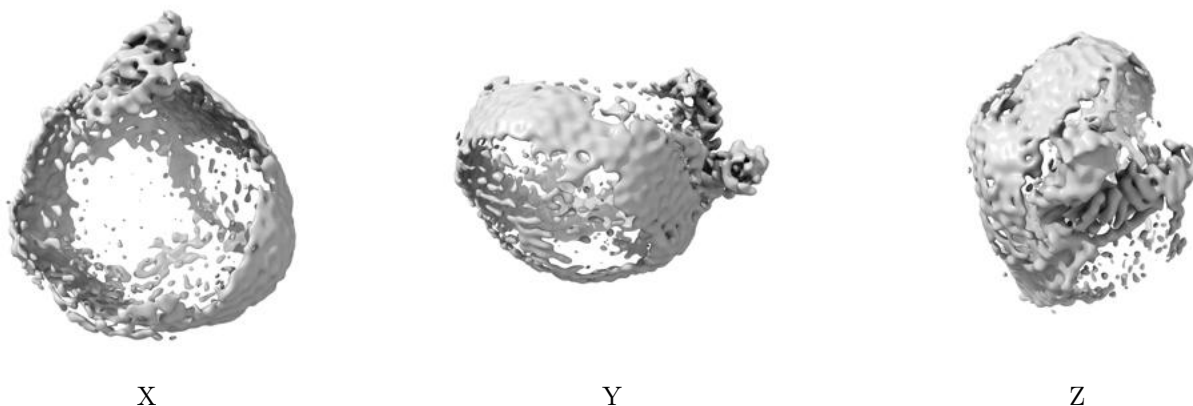


Z

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

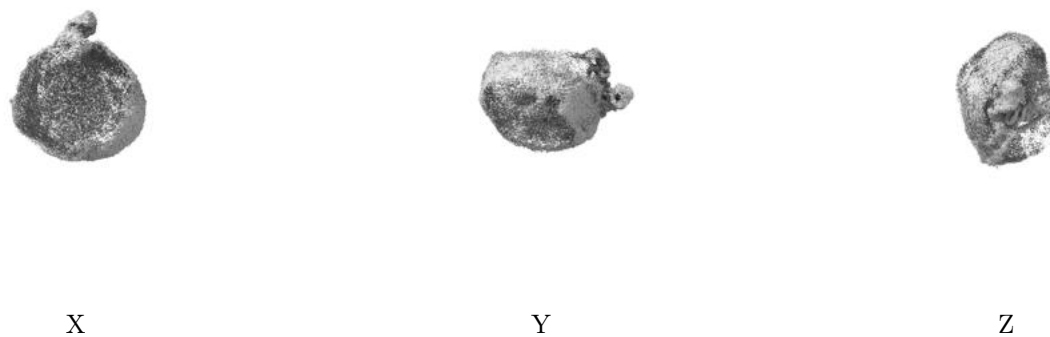
6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



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

6.5.2 Raw map



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

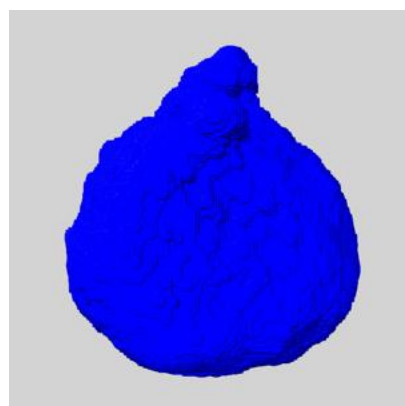
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

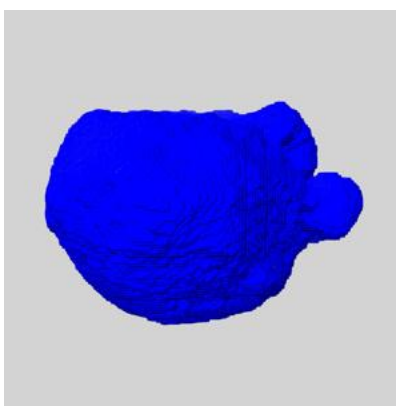
A mask typically either:

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

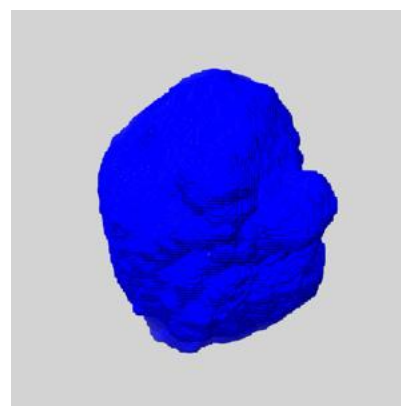
6.6.1 emd_47801_msk_1.map [i](#)



X



Y

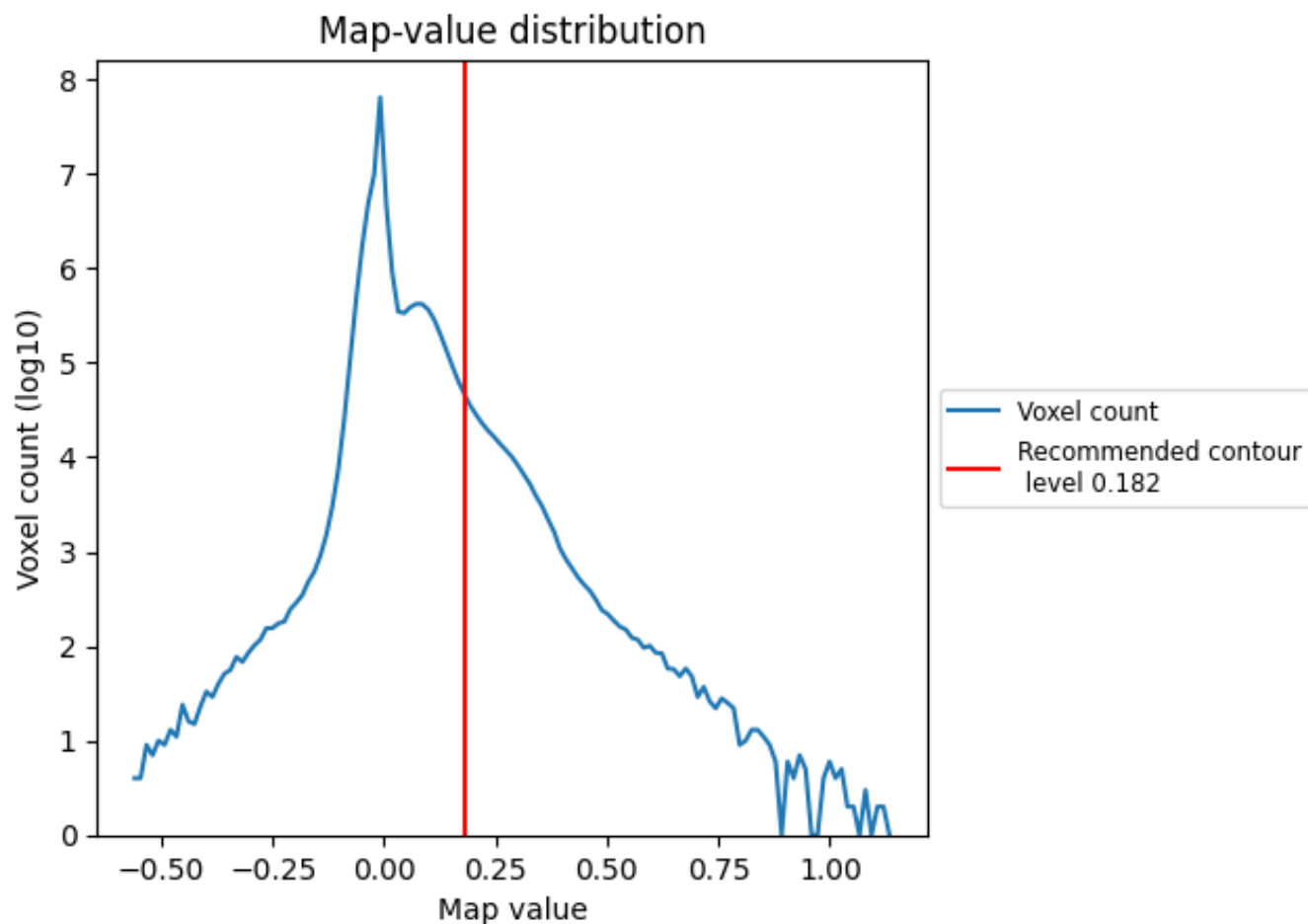


Z

7 Map analysis [i](#)

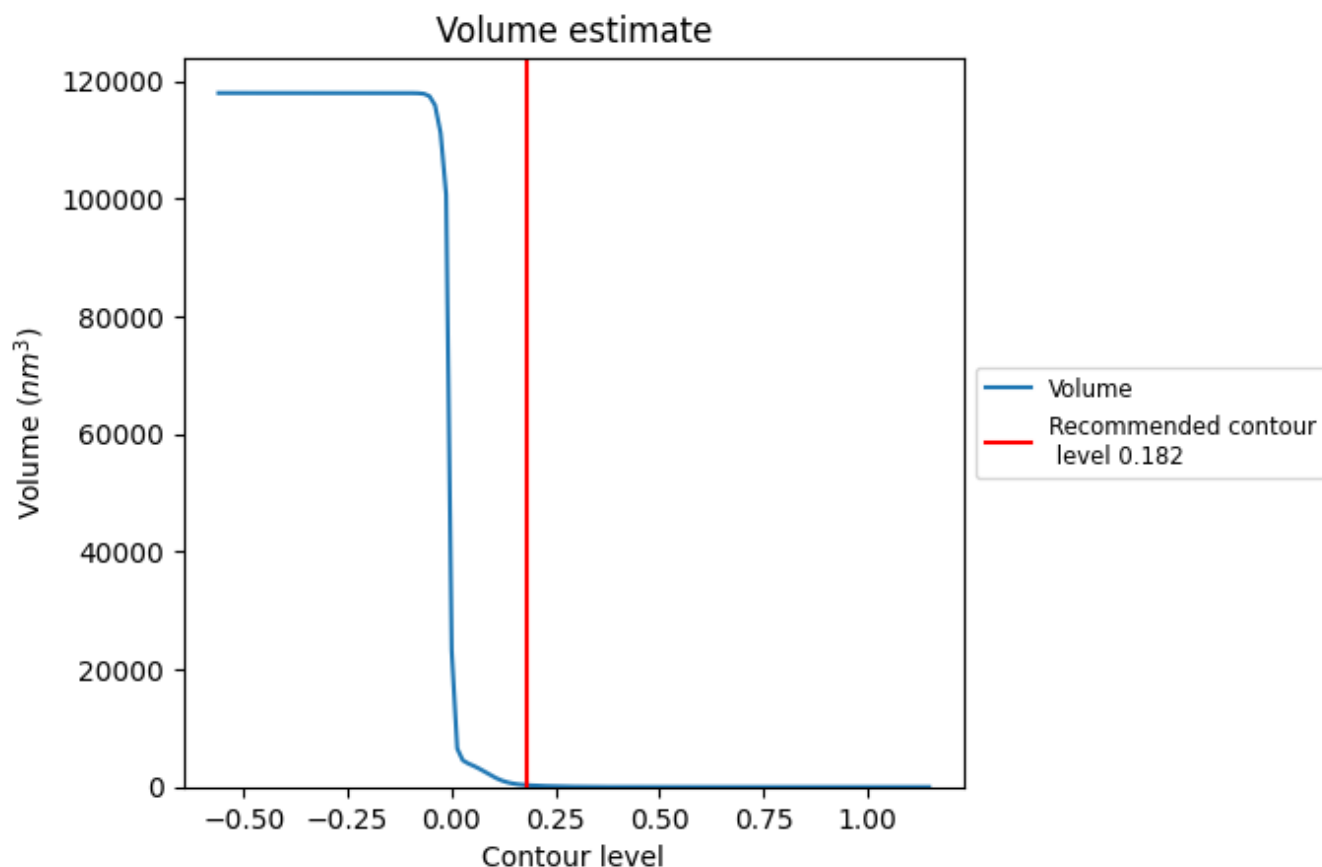
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



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

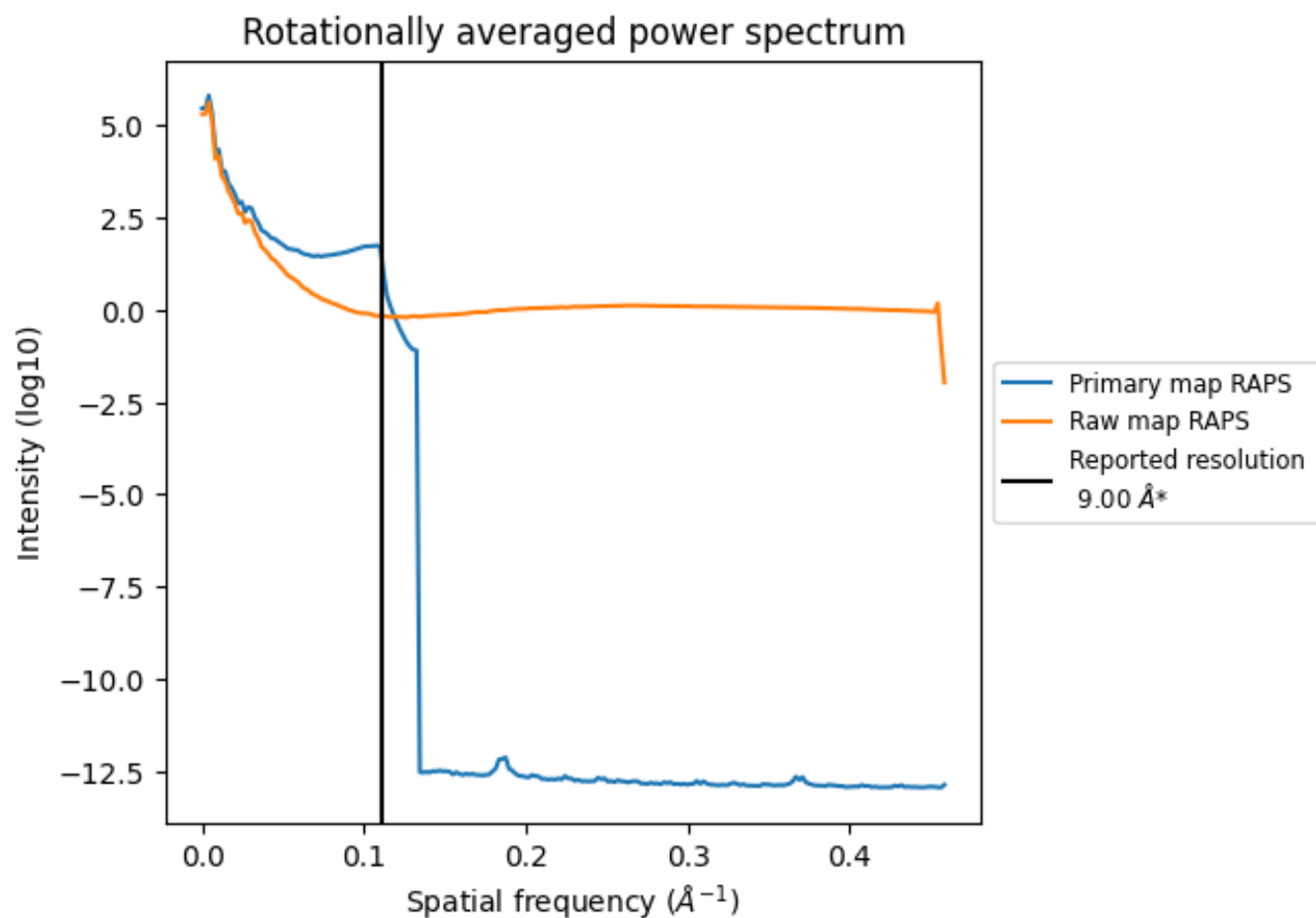
7.2 Volume estimate [i](#)



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

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

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ

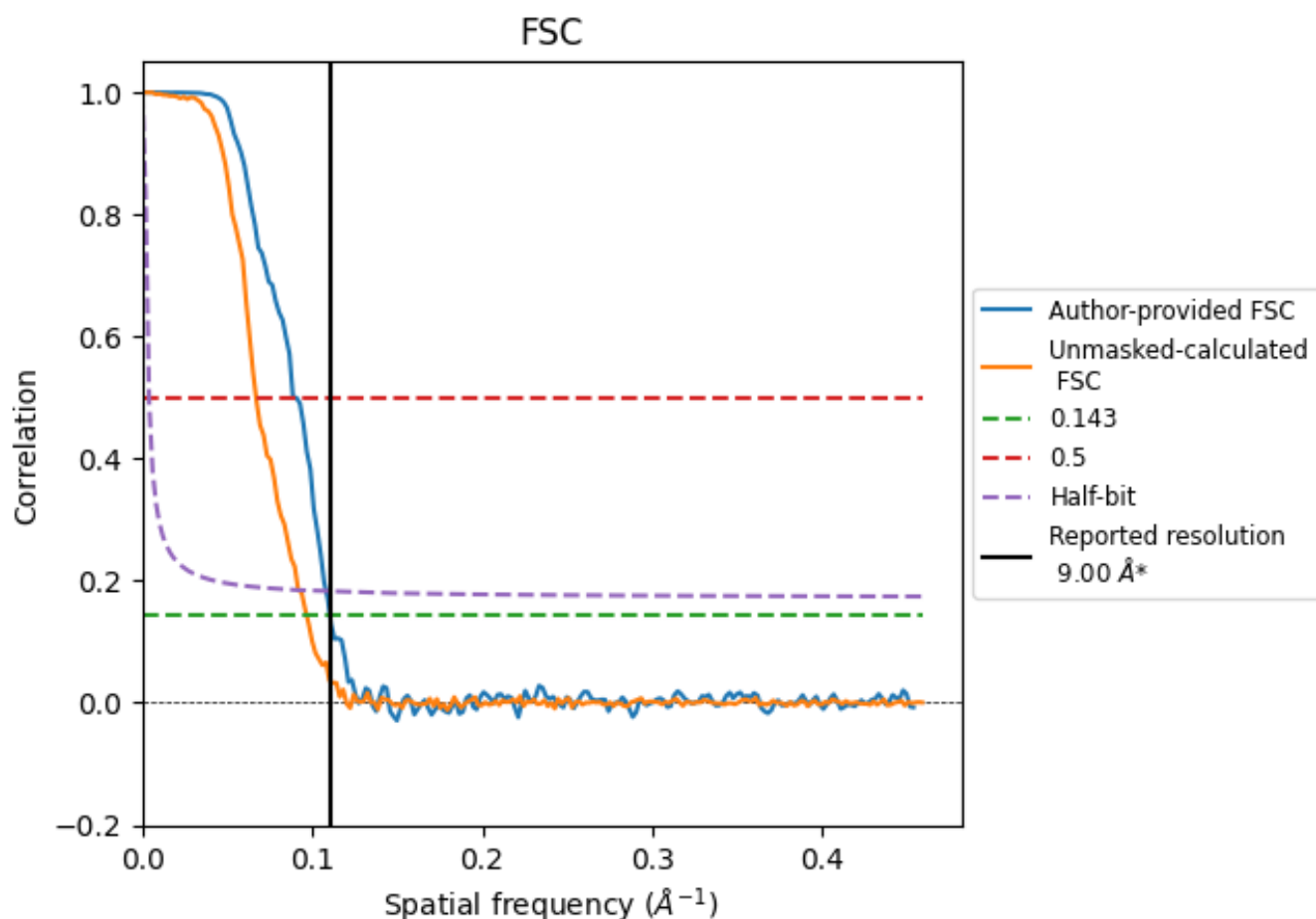


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.111 Å⁻¹

8 Fourier-Shell correlation [i](#)

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

8.1 FSC [i](#)



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

8.2 Resolution estimates [i](#)

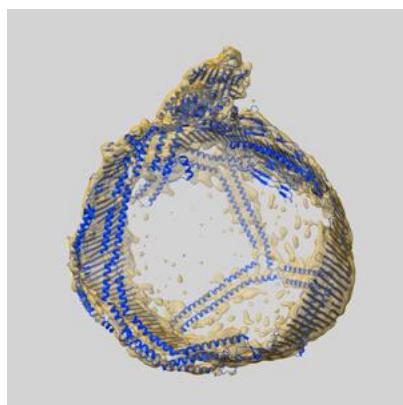
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	9.00	-	-
Author-provided FSC curve	9.06	11.27	9.24
Unmasked-calculated*	10.34	14.93	10.85

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

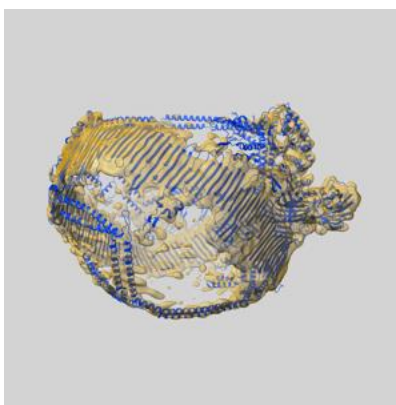
9 Map-model fit [i](#)

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

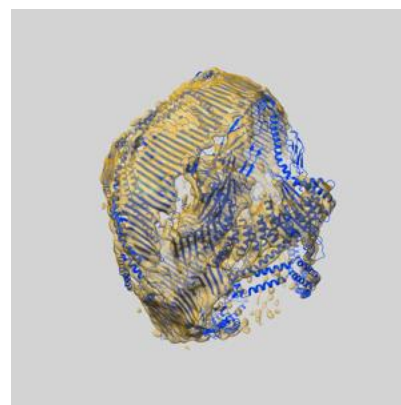
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



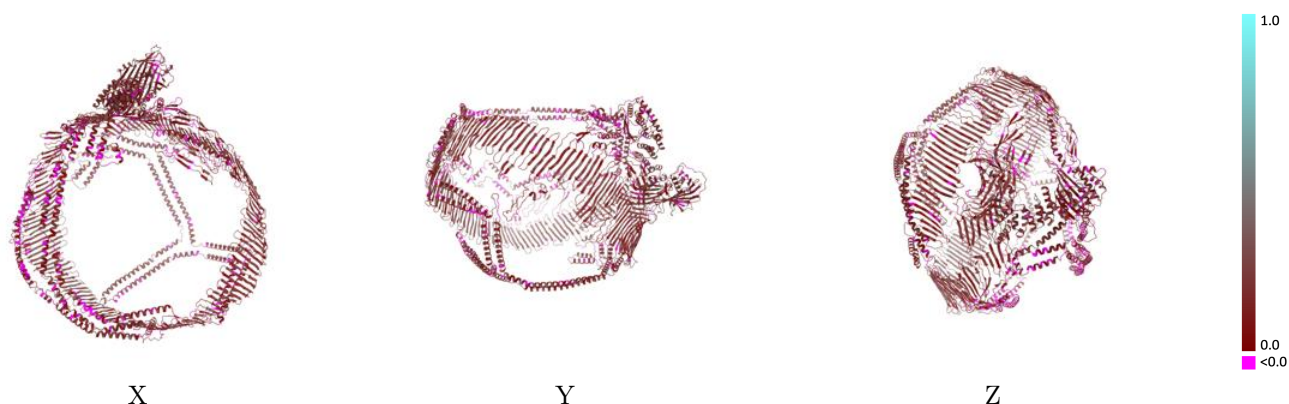
Y



Z

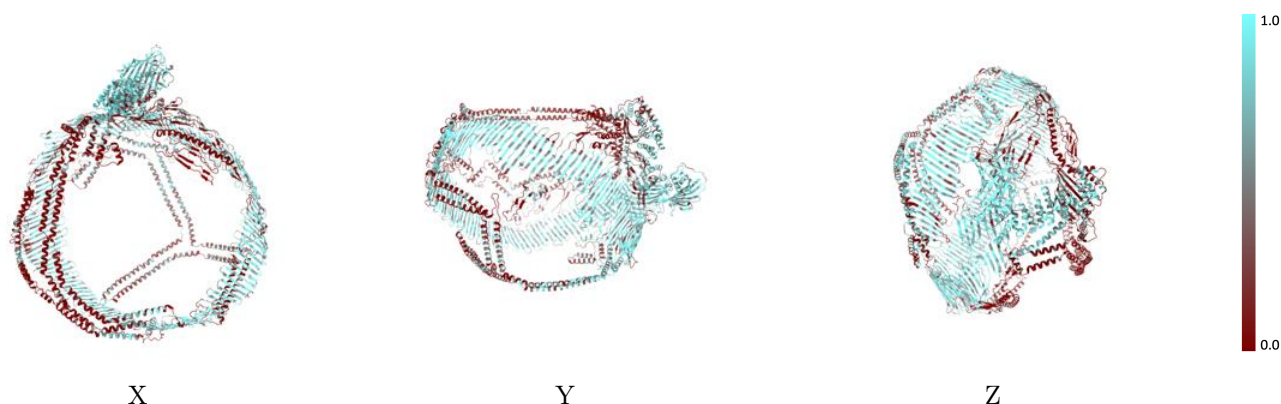
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.182 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



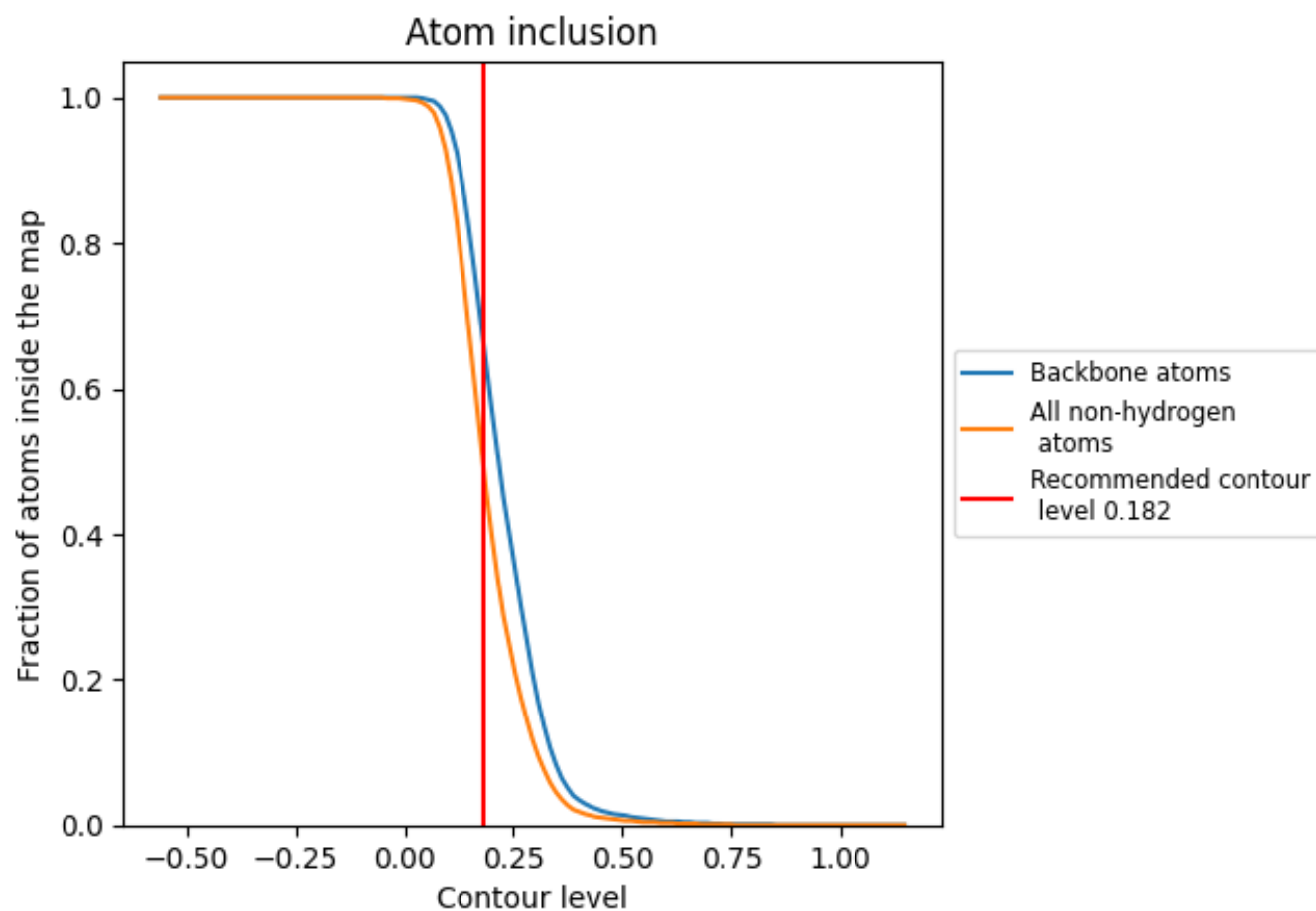
The images above show the model with each residue coloured according its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



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

9.4 Atom inclusion [i](#)



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

9.5 Map-model fit summary ⓘ

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

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	<div></div> 0.4900	<div></div> 0.1570
A	<div></div> 0.4900	<div></div> 0.1570

