



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Dec 2, 2025 – 12:45 pm GMT

PDB ID : 9I1I / pdb_00009i1i
EMDB ID : EMD-52570
Title : Cryo-EM structure of mouse RNF213 (WB3/WB4 + ATP)
Authors : Grabarczyk, D.B.; Ahel, J.; Clausen, T.
Deposited on : 2025-01-16
Resolution : 4.50 Å(reported)

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

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

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev129
Mogul : 1.8.4, CSD as541be (2020)
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
buster-report : 1.1.7 (2018)
Percentile statistics : 20231227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2023)
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.46

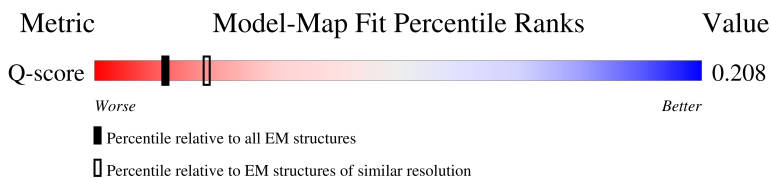
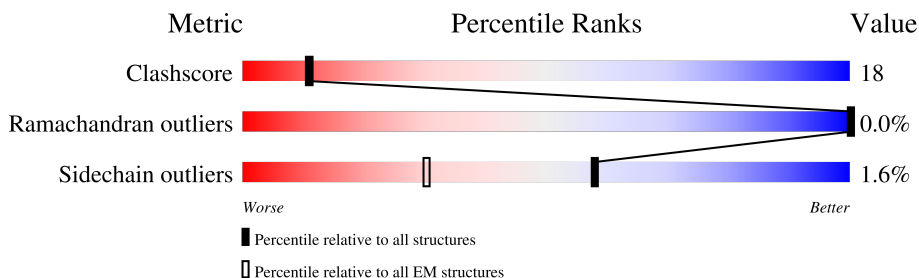
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY


The reported resolution of this entry is 4.50 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	210492	15764	-
Ramachandran outliers	207382	16835	-
Sidechain outliers	206894	16415	-
Q-score	-	25397	2937 (4.00 - 5.00)

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	5161	

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 36852 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 E3 ubiquitin-protein ligase RNF213.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	4584	Total	C	N	O	S	0	0
			36787	23443	6326	6799	219		

There are 15 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	2449	GLN	GLU	engineered mutation	UNP E9Q555
A	2806	GLN	GLU	engineered mutation	UNP E9Q555
A	5149	GLY	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5150	GLY	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5151	GLY	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5152	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5153	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5154	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5155	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5156	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5157	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5158	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5159	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5160	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555
A	5161	HIS	-	expression tag	UNP E9Q555

- Molecule 2 is ADENOSINE-5'-TRIPHOSPHATE (CCD ID: ATP) (formula: $C_{10}H_{16}N_5O_{13}P_3$) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf
2	A	1	Total 31	C 10	N 5	O 13	P 3	0
2	A	1	Total 31	C 10	N 5	O 13	P 3	0

- Molecule 3 is MAGNESIUM ION (CCD ID: MG) (formula: Mg) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).

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

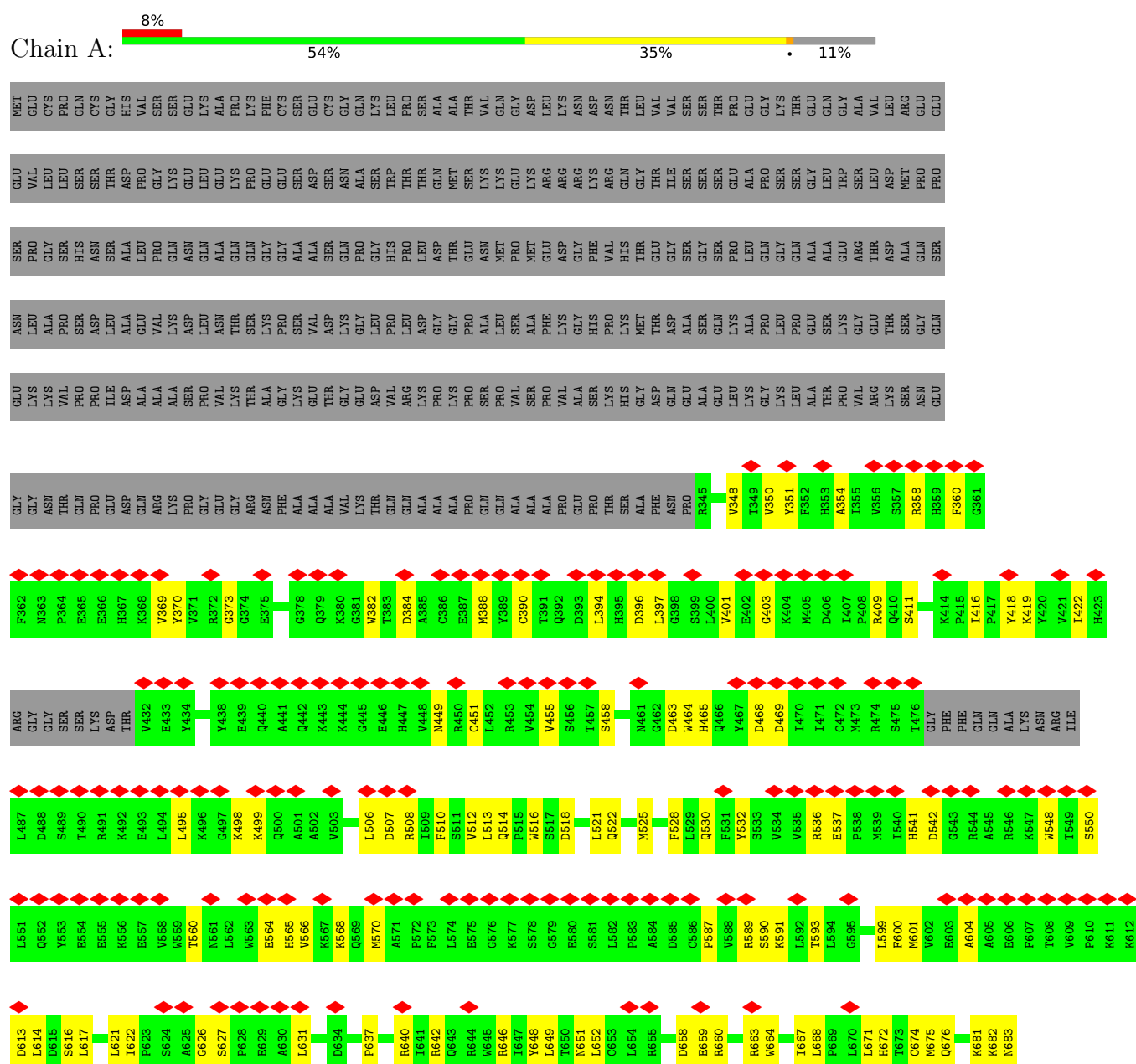
- Molecule 4 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms	AltConf
4	A	2	Total Zn 2 2	0

3 Residue-property plots

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

• Molecule 1: E3 ubiquitin-protein ligase RNF213





V2713	F2714	L2627	N2547	C2464	T2383	R2316	ARG	F2162	P2095	Q2025	G1949	E1837	H1751
K2715	K2716	D2632	D2548	D2465	G2384	R2319	GLN	Y2165	P2096	T2026	G1950	L1838	S1752
L2717	L2718	H2635	E2551	R2466	C2386	V2320	VAL	C2166	K2097	G2027	I1839	L1840	A1753
C2719	L2720	L2635	Q2556	V2468	T2388	P2821	THR	G2167	E2098	I2028	L1755	R1842	F1754
L2720	L2720	L2640	Q2557	L2473	R2389	F2322	ILE	L2167	T2099	P2029	H1757	C1843	L1756
K2723	K2723	P2641	L2588	D2476	L2390	N2323	GLU	L2176	D2101	F2033	A1956	L1844	H1760
L2724	L2724	L2642	Q2560	S2477	K2392	F2326	VAL	A2180	M2102	K2034	G1959	L1845	C1758
P2725	P2725	L2643	K2561	Q2478	F2393	D2327	THR	E2247	E2103	L2035	V1964	S1848	D1760
L2726	L2726	L2646	V2563	C2485	L2394	N2328	VAL	W2181	L2036	I2037	L1761	K1852	L1761
V2729	V2729	M2648	D2564	N2486	L2397	F2330	THR	F2182	T2037	T1965	L1764	G1765	L1764
G2733	G2733	A2649	S2565	P2487	C2400	R2331	GLU	L2183	PRO	Q2039	L1966	V1853	G1765
S2734	S2734	L2650	V2566	Y2488	S2401	Y2332	ARG	N2184	ARG	Y2040	L1967	Y1854	R1766
S2735	S2735	V2651	S2567	R2489	V2402	R2333	SER	L2187	HIS	L2041	H1968	L1857	C1767
K2736	K2736	V2652	V2568	H2491	E2403	K2334	THR	D2188	THR	W2042	L1970	L1770	A1769
S2737	S2737	N2569	N2569	S2492	A2404	E2336	ASP	D2189	ASP	D2043	L1971	L1878	L1771
K2740	K2740	E2572	E2572	Q2493	E2405	R2337	ASP	T2194	P2113	K2047	K1972	F1874	F1874
L2741	L2741	T2573	T2573	T2406	A2406	L2338	ASP	F2195	A2114	M2048	D1977	Q1876	Q1876
V2743	V2743	L2576	L2576	E2494	T2406	L2342	ASP	C2196	M2115	L2048	E1978	L1877	L1877
K2744	K2744	L2579	L2579	M2495	H2413	A2341	ASP	C2197	D2116	W2049	T1979	C1878	C1878
L2745	L2745	V2579	V2579	R2498	H2413	E2342	ASP	E2119	E2119	R2050	V1980	T1879	T1879
Q2748	Q2748	A2582	A2582	L2504	T2416	E2345	ASP	S2122	S2122	L2056	P1981	R1880	R1880
A2752	A2752	S2583	S2583	L2504	T2417	E2346	ASP	E2123	E2123	Y2057	P1982	A1881	A1881
L2756	L2756	Q2584	Q2584	V2508	M2420	T2347	ASP	A2124	A2124	L2058	K1983	H1882	H1882
T2757	T2757	N2585	N2585	L2510	Y2422	L2348	ASP	Q2125	Q2125	L2061	R1986	L1783	L1783
S2758	S2758	R2586	R2586	A2510	Y2422	E2352	ASP	R2127	R2127	Q2063	L1987	E1884	E1884
C2759	C2759	R2587	R2587	A2510	Y2422	T2353	ASP	L2205	L2205	T2062	L1887	Q1887	Q1887
L2760	L2760	A2681	A2681	A2510	Y2422	T2354	ASP	L2206	L2206	GLY	H1991	I1890	I1890
Q2761	Q2761	D2684	D2684	A2510	Y2422	T2355	ASP	L2207	L2207	LEU	L1992	L1794	L1794
Q2762	Q2762	E2685	E2685	A2510	Y2422	T2356	ASP	L2208	L2208	SER	D1993	L1901	L1901
L2765	L2765	V2686	V2686	A2510	Y2422	T2357	ASP	L2209	L2209	VAL	E1994	P1902	P1902
S2771	S2771	V2689	V2689	A2510	Y2422	T2358	ASP	L2210	L2210	PRO	N1995	S1903	S1903
S2774	S2774	Q2690	Q2690	A2510	Y2422	T2359	ASP	L2211	L2211	LYS	Q1816	F1905	F1905
T2775	T2775	L2699	L2699	A2510	Y2422	T2360	ASP	L2212	L2212	ARG	P2003	V1913	V1913
Q2777	Q2777	R2700	R2700	A2510	Y2422	T2361	ASP	L2213	L2213	SER	F2004	L1817	L1817
F2783	F2783	L2703	L2703	A2510	Y2422	T2362	ASP	L2214	L2214	SER	L2005	L1818	L1818
C2786	C2786	A2704	A2704	A2510	Y2422	T2363	ASP	L2215	L2215	LYS	K2006	Y1924	Y1924
D2794	D2794	R2705	R2705	A2510	Y2422	T2364	ASP	L2216	L2216	LEU	E2007	L1925	L1925
Q2797	Q2797	L2707	L2707	A2510	Y2422	T2365	ASP	L2217	L2217	ASN	K2008	Q1926	Q1926
L2709	L2709	R2709	R2709	A2510	Y2422	T2366	ASP	L2218	L2218	ALA	Y2009	S1927	S1927
K2710	K2710	E2711	E2711	A2510	Y2422	T2367	ASP	L2219	L2219	ARG	K2011	H1928	H1928
V2801	V2801	N2712	N2712	A2510	Y2422	T2368	ASP	L2220	L2220	ALA	M2012	Y1929	Y1929
V2802	V2802	E2622	E2622	A2510	Y2422	T2369	ASP	L2221	L2221	ALA	P2013	L1825	L1825
				A2510	Y2422	T2370	ASP	L2222	L2222	ALA	V2014	L1826	L1826
				A2510	Y2422	T2371	ASP	L2223	L2223	ALA	P2015	L1827	L1827
				A2510	Y2422	T2372	ASP	L2224	L2224	ALA	T2016	G1827	G1827
				A2510	Y2422	T2373	ASP	L2225	L2225	ALA	R1934	T1828	T1828
				A2510	Y2422	T2374	ASP	L2226	L2226	ALA	A1939	T1829	T1829
				A2510	Y2422	T2375	ASP	L2227	L2227	ALA	T1940	A1830	A1830
				A2510	Y2422	T2376	ASP	L2228	L2228	ALA	D2018	T1831	T1831
				A2510	Y2422	T2377	ASP	L2229	L2229	ALA	D2019	F1942	F1942
				A2510	Y2422	T2378	ASP	L2230	L2230	ALA	R1943	T1832	T1832
				A2510	Y2422	T2379	ASP	L2231	L2231	ALA	S2021	T1833	T1833
				A2510	Y2422	T2380	ASP	L2232	L2232	ALA	D1944	G1945	G1945
				A2510	Y2422	T2381	ASP	L2233	L2233	ALA	T2022	E1835	E1835
				A2510	Y2422	T2382	ASP	L2234	L2234	ALA	S2023	L1946	L1946
				A2510	Y2422	T2383	ASP	L2235	L2235	ALA	R2094		





4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	33242	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 ($e^-/\text{\AA}^2$)	30	Depositor
Minimum defocus (nm)	1000	Depositor
Maximum defocus (nm)	2000	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 (6k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.021	Depositor
Minimum map value	-0.007	Depositor
Average map value	-0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.001	Depositor
Recommended contour level	0.00484	Depositor
Map size (\AA)	373.12, 373.12, 373.12	wwPDB
Map dimensions	352, 352, 352	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (\AA)	1.06, 1.06, 1.06	Depositor

5 Model quality [i](#)

5.1 Standard geometry [i](#)

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

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	0.17	0/37557	0.40	2/50804 (0.0%)

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

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

There are no bond length outliers.

All (2) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	2051	ARG	CA-C-N	-5.71	105.81	122.38
1	A	2051	ARG	C-N-CA	-5.71	105.81	122.38

There are no chirality outliers.

All (1) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	4165	GLU	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	36787	0	36880	1338	0
2	A	62	0	24	11	0
3	A	1	0	0	0	0
4	A	2	0	0	0	0
All	All	36852	0	36904	1338	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 (1338) 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:1619:LEU:HD21	1:A:1622:LEU:HB3	1.49	0.95
1:A:1216:THR:HG21	1:A:1245:CYS:HB2	1.53	0.90
1:A:3025:PRO:HB3	1:A:3058:MET:HB2	1.57	0.87
1:A:2114:ALA:O	2:A:5201:ATP:N6	2.09	0.86
1:A:3006:THR:HG21	1:A:3011:ALA:HB2	1.58	0.85
1:A:3005:LEU:HD12	1:A:3116:VAL:HG11	1.59	0.84
1:A:3046:ILE:HG21	1:A:3092:LEU:HD21	1.60	0.83
1:A:2655:HIS:HE1	1:A:2661:LYS:HB3	1.44	0.82
1:A:3315:TYR:HA	1:A:3318:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:1718:CYS:HB3	1:A:1750:TYR:HE2	1.46	0.81
1:A:1939:ALA:HA	1:A:2056:LEU:HD12	1.63	0.81
1:A:1818:LEU:HD21	1:A:1928:HIS:HB3	1.63	0.80
1:A:4995:GLU:HA	1:A:4998:ARG:HD2	1.66	0.78
1:A:3098:LYS:H	1:A:3098:LYS:HD2	1.49	0.78
1:A:1590:LEU:HG	1:A:1646:LEU:HD12	1.66	0.77
1:A:2270:ASN:ND2	1:A:2275:THR:O	2.18	0.77
1:A:5069:LEU:HD11	1:A:5138:ALA:HB1	1.66	0.76
1:A:1558:MET:O	1:A:3050:LYS:NZ	2.19	0.76
1:A:778:ILE:HG23	1:A:783:MET:HE1	1.67	0.76
1:A:2330:PRO:HG2	1:A:2333:GLU:HB3	1.68	0.76
1:A:2353:THR:O	1:A:2557:GLN:NE2	2.19	0.76
1:A:2775:THR:HG22	1:A:2777:GLN:H	1.50	0.75
1:A:2651:GLY:HA2	1:A:2655:HIS:HB3	1.67	0.75
1:A:3176:VAL:HG23	1:A:3225:ALA:HB1	1.69	0.74
1:A:1326:ARG:NH2	1:A:1332:THR:O	2.20	0.74
1:A:3256:VAL:HG12	1:A:3260:GLN:HE22	1.52	0.73
1:A:2736:LYS:N	2:A:5205:ATP:O1B	2.20	0.73
1:A:3122:VAL:HG23	1:A:3123:PRO:HD3	1.71	0.73
1:A:2386:GLY:HA2	1:A:2389:ARG:HH21	1.55	0.72
1:A:2382:GLU:HG2	1:A:2487:PRO:HG3	1.71	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2492:SER:HB3	1:A:2592:ASN:HB3	1.71	0.72
1:A:419:LYS:HG3	1:A:449:ASN:HB2	1.72	0.72
1:A:2116:ASP:HB3	1:A:2119:GLU:HB2	1.71	0.72
1:A:1768:LEU:HA	1:A:1771:LEU:HD12	1.71	0.71
1:A:3932:LYS:HZ2	1:A:4012:ARG:HA	1.53	0.71
1:A:2141:LEU:HB2	1:A:2209:LYS:HD3	1.72	0.71
1:A:2741:ILE:HG21	1:A:3078:TYR:HE2	1.55	0.71
1:A:3976:ILE:HG13	1:A:3977:PRO:HD3	1.73	0.71
1:A:495:LEU:HG	1:A:499:LYS:HE3	1.73	0.70
1:A:2215:PHE:HE2	1:A:2265:PRO:HB2	1.53	0.70
1:A:2714:PHE:O	1:A:2718:ILE:HG12	1.91	0.70
1:A:1377:ARG:HH22	1:A:1455:LEU:HD22	1.56	0.70
1:A:1625:LEU:HB3	1:A:1736:LEU:HD11	1.73	0.70
1:A:1377:ARG:HD2	1:A:1377:ARG:O	1.91	0.70
1:A:4960:SER:O	1:A:5032:GLN:NE2	2.23	0.70
1:A:2166:CYS:O	1:A:2221:ARG:NH1	2.25	0.70
1:A:2716:MET:O	1:A:2720:ILE:HG12	1.92	0.70
1:A:1740:LEU:O	1:A:1744:MET:HG3	1.92	0.69
1:A:3365:GLN:NE2	1:A:3369:ASP:O	2.25	0.69
1:A:2734:SER:N	2:A:5205:ATP:O2B	2.25	0.69
1:A:3480:LEU:HD21	1:A:3578:VAL:HG21	1.74	0.69
1:A:1657:ARG:O	1:A:1664:ASN:ND2	2.25	0.69
1:A:893:MET:HG2	1:A:894:LEU:HG	1.75	0.69
1:A:1676:SER:O	1:A:1680:LYS:NZ	2.25	0.69
1:A:2012:MET:SD	1:A:2013:PRO:HD2	2.33	0.68
1:A:3549:TRP:HB2	1:A:3573:ARG:HE	1.57	0.68
1:A:4583:ASP:O	1:A:4587:HIS:ND1	2.21	0.68
1:A:896:ILE:HG12	1:A:901:VAL:HB	1.76	0.68
1:A:2510:ALA:O	1:A:2516:ARG:NH2	2.26	0.68
1:A:3050:LYS:HA	1:A:3053:MET:HE2	1.76	0.68
1:A:3937:LYS:HG3	1:A:3942:PHE:HA	1.76	0.68
1:A:1256:LEU:HD13	1:A:1261:ILE:HG21	1.75	0.68
1:A:794:LEU:HD22	1:A:844:LEU:HD11	1.74	0.68
1:A:4957:GLN:O	1:A:5005:GLN:NE2	2.26	0.68
1:A:3479:ARG:NH1	1:A:5000:CYS:SG	2.67	0.68
1:A:4780:ASN:OD1	1:A:4783:ARG:NH1	2.27	0.68
1:A:536:ARG:HG3	1:A:537:GLU:HG3	1.76	0.67
1:A:3780:ARG:HD3	1:A:3842:PRO:HB3	1.77	0.67
1:A:1325:VAL:HG11	1:A:1381:LEU:HD12	1.76	0.67
1:A:2935:LEU:HB3	1:A:2940:ILE:HD11	1.76	0.67
1:A:687:GLN:HG3	1:A:688:PRO:HD2	1.74	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1249:PHE:HE2	1:A:1290:MET:HE3	1.59	0.67
1:A:1279:GLU:HG3	1:A:2884:LEU:HD11	1.75	0.67
1:A:2494:GLU:OE1	1:A:2498:ARG:NH2	2.23	0.67
1:A:2593:GLU:HG2	1:A:2596:PHE:H	1.58	0.67
1:A:1582:ARG:HD2	1:A:3035:GLN:HB2	1.76	0.67
1:A:1284:LEU:HG	1:A:1299:ILE:HG22	1.77	0.67
1:A:1097:TRP:HD1	1:A:1113:VAL:HG23	1.59	0.67
1:A:2215:PHE:CE2	1:A:2265:PRO:HB2	2.30	0.67
1:A:908:GLU:O	1:A:911:VAL:HB	1.94	0.67
1:A:1031:TRP:HD1	1:A:1033:ASP:H	1.43	0.67
1:A:1564:HIS:O	1:A:1568:THR:OG1	2.08	0.67
1:A:2854:LYS:O	1:A:2857:ARG:NH2	2.28	0.67
1:A:1512:GLU:OE1	1:A:1527:ARG:NH2	2.28	0.67
1:A:4100:ILE:HG13	1:A:4172:VAL:HG11	1.76	0.67
1:A:1020:ASP:OD2	1:A:1021:VAL:N	2.28	0.66
1:A:1784:PRO:HB3	1:A:1812:GLN:HE22	1.60	0.66
1:A:3000:ARG:NH1	1:A:3126:ASN:O	2.28	0.66
1:A:3713:TYR:HH	1:A:3765:HIS:HE2	1.44	0.66
1:A:1993:ASP:OD1	1:A:1995:ASN:ND2	2.28	0.66
1:A:2040:TYR:HE2	1:A:2042:MET:HB3	1.60	0.66
1:A:710:ARG:HG3	1:A:713:PRO:HD3	1.77	0.66
1:A:728:GLU:OE1	1:A:760:ARG:NH2	2.29	0.66
1:A:1531:PRO:HB3	1:A:1540:LEU:HD12	1.78	0.66
1:A:4972:GLU:HG2	1:A:5022:TRP:HE1	1.59	0.66
1:A:1470:ASP:OD2	1:A:3084:GLY:N	2.29	0.66
1:A:2609:PHE:HZ	1:A:2642:VAL:HG23	1.61	0.66
1:A:3413:ASP:OD2	1:A:3415:THR:OG1	2.13	0.66
1:A:1575:GLU:HG3	1:A:1632:ILE:HD11	1.78	0.65
1:A:3879:PHE:O	1:A:3883:VAL:HG12	1.95	0.65
1:A:5077:HIS:HA	1:A:5080:ILE:HD12	1.78	0.65
1:A:2165:TYR:O	1:A:2221:ARG:NH2	2.29	0.65
1:A:4538:LEU:HD13	1:A:4563:LEU:HD23	1.78	0.65
1:A:2157:GLU:O	1:A:2161:HIS:ND1	2.29	0.65
1:A:909:MET:HE3	1:A:913:ARG:HG3	1.77	0.65
1:A:2450:ALA:HB1	1:A:2459:ILE:HD13	1.78	0.65
1:A:3880:VAL:HG23	1:A:3884:LEU:HD12	1.77	0.65
1:A:2041:LEU:HD23	1:A:2049:TRP:HD1	1.60	0.65
1:A:3219:ASP:OD1	1:A:3252:HIS:NE2	2.29	0.65
1:A:2357:THR:OG1	1:A:2359:ASP:OD1	2.15	0.65
1:A:2665:ARG:HB3	1:A:2679:SER:HB3	1.78	0.65
1:A:1780:GLU:O	1:A:1816:GLN:NE2	2.29	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2130:GLN:HE22	1:A:2145:GLN:HG3	1.61	0.65
1:A:3337:GLN:HA	1:A:3376:VAL:HG23	1.78	0.65
1:A:950:PHE:CD1	1:A:972:VAL:HG21	2.31	0.65
1:A:2282:HIS:HB2	1:A:2294:ILE:O	1.96	0.65
1:A:1640:ARG:NH1	1:A:3310:GLN:O	2.31	0.64
1:A:1029:LEU:HD12	1:A:1089:HIS:HB2	1.79	0.64
1:A:2736:LYS:NZ	2:A:5205:ATP:O3G	2.27	0.64
1:A:3003:LEU:HD11	1:A:3120:PHE:HE2	1.62	0.64
1:A:1956:ALA:HB3	1:A:2534:PRO:HB2	1.80	0.64
1:A:4571:LEU:HA	1:A:4574:LEU:HD12	1.80	0.64
1:A:4263:GLN:HE21	1:A:4267:VAL:HG11	1.62	0.64
1:A:835:PHE:HE1	1:A:914:ARG:HB3	1.62	0.64
1:A:876:GLU:OE1	1:A:3544:ARG:NH2	2.30	0.64
1:A:1803:LEU:HD22	1:A:2033:PHE:CD1	2.32	0.64
1:A:3344:THR:HG23	1:A:3346:SER:H	1.62	0.64
1:A:2096:PRO:HB3	1:A:2159:LEU:HD21	1.78	0.64
1:A:2133:LYS:O	1:A:2137:GLN:NE2	2.31	0.64
1:A:4425:PHE:HB3	1:A:4617:ARG:HD2	1.80	0.64
1:A:627:SER:HA	1:A:726:VAL:HG12	1.78	0.63
1:A:514:GLN:NE2	1:A:587:PRO:O	2.32	0.63
1:A:3130:LYS:O	1:A:3131:HIS:ND1	2.32	0.63
1:A:3589:ILE:O	1:A:3594:ASN:ND2	2.29	0.63
1:A:1987:LEU:HD23	1:A:1992:LEU:HD11	1.79	0.63
1:A:3324:TRP:HH2	1:A:3371:VAL:HG13	1.63	0.63
1:A:449:ASN:ND2	1:A:541:HIS:O	2.31	0.63
1:A:1450:ASP:O	1:A:1454:HIS:ND1	2.30	0.63
1:A:2999:SER:O	1:A:3077:GLN:NE2	2.32	0.63
1:A:886:ARG:NH2	1:A:3230:SER:OG	2.32	0.62
1:A:1721:GLU:OE1	1:A:1724:LYS:NZ	2.32	0.62
1:A:3998:SER:OG	1:A:4002:ARG:NH2	2.30	0.62
1:A:5061:GLY:HA2	1:A:5064:LEU:HD12	1.81	0.62
1:A:1826:LEU:HG	1:A:1857:LEU:HD13	1.81	0.62
1:A:1964:VAL:HG11	1:A:2017:HIS:CG	2.34	0.62
1:A:390:CYS:HA	1:A:401:VAL:HG12	1.80	0.62
1:A:1321:VAL:HG21	1:A:1382:GLU:HG3	1.82	0.62
1:A:2429:GLU:HG2	1:A:2433:PHE:CZ	2.35	0.62
1:A:3594:ASN:HB3	1:A:3611:TRP:HE1	1.63	0.62
1:A:4322:TYR:HB2	1:A:4368:LEU:HD21	1.80	0.62
1:A:2119:GLU:O	1:A:2122:SER:OG	2.18	0.62
1:A:3327:ASN:O	1:A:3332:LYS:NZ	2.30	0.62
1:A:3120:PHE:HB3	1:A:3125:ILE:HD11	1.80	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4089:LEU:O	1:A:4131:SER:OG	2.17	0.61
1:A:4242:GLN:OE1	1:A:4655:ASN:ND2	2.33	0.61
1:A:4868:VAL:HA	1:A:4872:LEU:HB3	1.82	0.61
1:A:2005:LEU:HG	1:A:2011:LYS:HZ3	1.64	0.61
1:A:3256:VAL:HG22	1:A:3292:LEU:HD13	1.81	0.61
1:A:4270:MET:HB3	1:A:4652:ILE:HG13	1.81	0.61
1:A:1073:LEU:O	1:A:1120:ARG:NH2	2.33	0.61
1:A:2380:MET:HB3	1:A:2542:ASP:HA	1.82	0.61
1:A:4137:SER:O	1:A:4870:ARG:NH1	2.33	0.61
1:A:5118:VAL:HA	1:A:5122:PHE:HB2	1.81	0.61
1:A:2498:ARG:NH2	1:A:2592:ASN:OD1	2.32	0.61
1:A:4513:VAL:HG13	1:A:4515:GLU:H	1.66	0.61
1:A:369:VAL:HG22	1:A:422:ILE:HG12	1.81	0.61
1:A:1528:LEU:HB3	1:A:1543:TYR:HB2	1.81	0.61
1:A:3189:VAL:O	1:A:3193:VAL:HG22	2.01	0.61
1:A:1139:ARG:HH21	1:A:2964:LEU:HD13	1.65	0.61
1:A:2883:ARG:NH2	1:A:2886:GLN:OE1	2.34	0.61
1:A:5048:TYR:OH	1:A:5093:PHE:O	2.19	0.61
1:A:1239:GLU:HA	1:A:1243:ASN:HB2	1.82	0.61
1:A:1704:VAL:HA	1:A:1707:THR:HG22	1.82	0.61
1:A:3501:ARG:O	1:A:3505:ARG:N	2.28	0.61
1:A:4182:ARG:HH22	1:A:4683:ILE:HG22	1.66	0.61
1:A:2406:THR:HG23	1:A:2443:THR:HA	1.82	0.61
1:A:1114:ARG:O	1:A:1118:LYS:HG2	2.01	0.60
1:A:2733:GLY:HA3	1:A:2914:LEU:HB2	1.82	0.60
1:A:2979:ILE:HD12	1:A:3002:LEU:HD11	1.82	0.60
1:A:3980:MET:HE3	1:A:3989:LEU:HB3	1.83	0.60
1:A:4676:SER:HB2	1:A:4679:HIS:HB2	1.82	0.60
1:A:1127:LEU:O	1:A:1131:LYS:HG2	2.01	0.60
1:A:1312:LEU:O	1:A:1316:VAL:HG23	2.01	0.60
1:A:2035:LEU:HD11	1:A:2057:TYR:HE2	1.66	0.60
1:A:3565:THR:OG1	1:A:3566:PHE:N	2.35	0.60
1:A:1559:SER:OG	1:A:1560:GLY:N	2.34	0.60
1:A:766:GLN:NE2	1:A:817:GLU:OE2	2.29	0.60
1:A:1733:GLU:HG2	1:A:1738:GLY:HA3	1.84	0.60
1:A:1434:GLY:HA3	1:A:1468:LEU:HD21	1.82	0.60
1:A:2282:HIS:ND1	1:A:2323:ASN:OD1	2.34	0.60
1:A:3282:ARG:HA	1:A:3378:LYS:HD2	1.83	0.60
1:A:1841:ARG:O	1:A:1845:THR:HG23	2.00	0.60
1:A:2035:LEU:HD11	1:A:2057:TYR:CE2	2.36	0.60
1:A:2167:GLY:HA3	1:A:2221:ARG:HH12	1.66	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2435:ASN:O	1:A:2439:HIS:HB2	2.02	0.60
1:A:2725:PRO:HG3	1:A:2825:LEU:HD12	1.82	0.60
1:A:3035:GLN:HE21	1:A:3312:ASP:HB2	1.67	0.60
1:A:1943:ARG:HG3	1:A:1946:LEU:HD13	1.84	0.60
1:A:2594:CYS:SG	1:A:2595:GLY:N	2.75	0.60
1:A:2213:VAL:O	1:A:2217:ILE:HG12	2.02	0.60
1:A:2369:MET:HE2	1:A:2369:MET:HA	1.83	0.60
1:A:411:SER:HB3	1:A:416:ILE:HD11	1.83	0.59
1:A:2707:LEU:HD23	1:A:2710:LYS:HD2	1.84	0.59
1:A:510:PHE:HE1	1:A:601:MET:HE1	1.66	0.59
1:A:2648:MET:HA	1:A:2648:MET:HE2	1.84	0.59
1:A:4338:PRO:O	1:A:4343:LEU:N	2.35	0.59
1:A:4532:LEU:HD23	1:A:4535:LEU:HD21	1.83	0.59
1:A:2283:LEU:O	1:A:2323:ASN:ND2	2.36	0.59
1:A:2520:ILE:HD12	1:A:2521:PRO:HD2	1.84	0.59
1:A:3881:GLU:HA	1:A:3885:LEU:HD23	1.85	0.59
1:A:4272:ARG:HD2	1:A:4587:HIS:CE1	2.37	0.59
1:A:695:LEU:HD23	1:A:698:ILE:HB	1.85	0.59
1:A:1599:ARG:HH12	1:A:1672:VAL:HG21	1.67	0.59
1:A:1529:LEU:HD13	1:A:1540:LEU:HD21	1.82	0.59
1:A:3028:ILE:HD13	1:A:3059:VAL:HG13	1.83	0.59
1:A:1602:THR:HG23	1:A:1616:ASN:HB3	1.83	0.59
1:A:4046:LEU:HD11	1:A:4084:LEU:HD12	1.83	0.59
1:A:4164:GLN:HG2	1:A:4171:SER:H	1.66	0.59
1:A:2141:LEU:HD13	1:A:2209:LYS:HB2	1.84	0.59
1:A:2279:ILE:HG12	1:A:2326:PHE:HE2	1.68	0.59
1:A:2971:GLU:OE1	1:A:2971:GLU:N	2.36	0.59
1:A:4883:GLN:HE22	1:A:4893:GLU:HB3	1.68	0.59
1:A:1474:ASP:OD2	1:A:3083:GLY:N	2.36	0.59
1:A:506:LEU:HD23	1:A:565:HIS:HD2	1.68	0.59
1:A:1474:ASP:O	1:A:1478:ASN:ND2	2.36	0.59
1:A:1986:ARG:NH1	1:A:2019:ASP:OD2	2.36	0.59
1:A:4391:GLU:HA	1:A:4394:VAL:HG12	1.83	0.59
1:A:893:MET:HE2	1:A:937:ARG:HD2	1.85	0.58
1:A:2041:LEU:HB2	1:A:2049:TRP:HB3	1.84	0.58
1:A:3544:ARG:O	1:A:3544:ARG:NH1	2.36	0.58
1:A:3795:ALA:HB1	1:A:3801:LEU:HD21	1.84	0.58
1:A:1028:LEU:HD12	1:A:1034:VAL:HG21	1.84	0.58
1:A:2039:GLN:O	1:A:2051:ARG:N	2.33	0.58
1:A:2128:PRO:HB2	1:A:2162:PHE:HZ	1.67	0.58
1:A:2508:VAL:HG23	1:A:2523:ARG:HH12	1.67	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2916:ASP:OD1	1:A:3000:ARG:NH2	2.23	0.58
1:A:3710:LEU:O	1:A:3714:LEU:HD22	2.02	0.58
1:A:1417:GLU:OE1	1:A:1417:GLU:N	2.27	0.58
1:A:2705:ARG:O	1:A:2710:LYS:NZ	2.36	0.58
1:A:1551:LEU:O	1:A:1555:LEU:HG	2.03	0.58
1:A:2306:VAL:HG23	1:A:2307:MET:HG3	1.84	0.58
1:A:4026:MET:O	1:A:4029:LYS:NZ	2.36	0.58
1:A:732:ARG:HA	1:A:735:LEU:HD12	1.84	0.58
1:A:3063:ASN:ND2	1:A:3066:ASN:HD21	2.01	0.58
1:A:3112:GLU:O	1:A:3116:VAL:HG12	2.02	0.58
1:A:1713:LYS:HD2	1:A:1716:ARG:HD3	1.85	0.58
1:A:1880:ARG:NH1	1:A:5145:ARG:O	2.37	0.58
1:A:4201:LEU:HD23	1:A:4205:LYS:HB3	1.85	0.58
1:A:4304:MET:HE3	1:A:4304:MET:HA	1.86	0.58
1:A:2712:ASN:HD21	1:A:2863:ARG:HH12	1.49	0.58
1:A:783:MET:HA	1:A:786:ASP:HB3	1.85	0.58
1:A:3034:PRO:HG2	1:A:3312:ASP:HA	1.86	0.58
1:A:4125:ILE:HG21	1:A:4182:ARG:HH11	1.69	0.58
1:A:4779:TRP:HE1	1:A:4803:LEU:HD23	1.69	0.58
1:A:1076:GLY:O	1:A:1168:LEU:N	2.37	0.57
1:A:1088:GLU:HG3	1:A:1089:HIS:CE1	2.38	0.57
1:A:2223:PHE:HZ	1:A:2366:ALA:HA	1.68	0.57
1:A:4107:LEU:HD13	1:A:4120:LEU:HD11	1.84	0.57
1:A:2134:ARG:NH1	1:A:2145:GLN:OE1	2.37	0.57
1:A:894:LEU:HD11	1:A:941:GLU:HG3	1.86	0.57
1:A:1582:ARG:NH2	1:A:3312:ASP:OD2	2.37	0.57
1:A:3610:LEU:HB3	1:A:3656:PRO:HG2	1.87	0.57
1:A:1552:LEU:O	1:A:1556:MET:HB2	2.04	0.57
1:A:4738:VAL:HG22	1:A:4922:LEU:HG	1.87	0.57
1:A:4106:GLN:HA	1:A:4109:LYS:HE3	1.87	0.57
1:A:1942:PHE:O	1:A:1944:ASP:N	2.38	0.57
1:A:5052:LEU:HD22	1:A:5056:HIS:HB3	1.87	0.57
1:A:2040:TYR:CE2	1:A:2042:MET:HB3	2.40	0.57
1:A:2707:LEU:O	1:A:2711:GLU:HB2	2.05	0.57
1:A:599:LEU:HD12	1:A:652:LEU:HD22	1.87	0.57
1:A:1598:PHE:HA	1:A:1601:TRP:HB2	1.86	0.57
1:A:418:TYR:N	1:A:449:ASN:OD1	2.38	0.56
1:A:1311:THR:O	1:A:1314:GLN:NE2	2.34	0.56
1:A:1390:LEU:O	1:A:1394:LEU:HG	2.04	0.56
1:A:2248:GLU:OE1	1:A:2248:GLU:N	2.35	0.56
1:A:5099:LEU:HD12	1:A:5126:ILE:HG12	1.86	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1316:VAL:HA	1:A:1341:LEU:HD21	1.87	0.56
1:A:1853:VAL:HA	1:A:1887:GLN:HB2	1.86	0.56
1:A:2210:ASN:OD1	1:A:2211:PHE:N	2.39	0.56
1:A:2354:TYR:HB3	1:A:2393:PHE:HE2	1.70	0.56
1:A:2492:SER:HB2	1:A:2591:GLU:HG3	1.85	0.56
1:A:2579:VAL:HG21	1:A:2672:PHE:HE1	1.70	0.56
1:A:4407:ILE:HB	1:A:4604:VAL:HG11	1.86	0.56
1:A:1749:VAL:HG12	1:A:1750:TYR:CD1	2.41	0.56
1:A:1833:ILE:O	1:A:1837:GLU:HG2	2.05	0.56
1:A:3015:LEU:HA	1:A:3019:PHE:CD1	2.41	0.56
1:A:3195:ARG:NH2	1:A:3397:ARG:HG3	2.20	0.56
1:A:4770:ASP:OD1	1:A:4771:ARG:N	2.38	0.56
1:A:4868:VAL:HG12	1:A:4872:LEU:HD23	1.86	0.56
1:A:815:LEU:HB3	1:A:873:THR:HG21	1.87	0.56
1:A:1253:TYR:CE1	1:A:1287:MET:HG3	2.41	0.56
1:A:1972:LYS:HG2	1:A:1978:GLU:HG3	1.87	0.56
1:A:2338:LEU:HD21	1:A:2361:MET:HG2	1.88	0.56
1:A:3072:TYR:HA	1:A:3075:LEU:HB2	1.86	0.56
1:A:4587:HIS:NE2	1:A:4662:TYR:OH	2.38	0.56
1:A:3872:ARG:HE	1:A:3873:ILE:HG23	1.71	0.56
1:A:4953:THR:O	1:A:4957:GLN:HG3	2.05	0.56
1:A:4429:MET:HE3	1:A:4503:HIS:HA	1.86	0.56
1:A:1233:SER:HB3	1:A:1235:PRO:HD2	1.88	0.56
1:A:2131:TYR:HD2	1:A:2187:LEU:HD13	1.70	0.56
1:A:2194:ILE:HA	1:A:2197:LYS:HE3	1.88	0.56
1:A:3191:GLN:HB3	1:A:3195:ARG:NH1	2.21	0.56
1:A:3271:ARG:NH2	1:A:3367:THR:O	2.38	0.56
1:A:1718:CYS:O	1:A:1722:VAL:HG23	2.05	0.56
1:A:4727:LEU:HD13	1:A:4830:LEU:HD12	1.87	0.56
1:A:1600:THR:HB	1:A:1618:GLY:HA3	1.87	0.56
1:A:2294:ILE:HD13	1:A:2300:LYS:O	2.06	0.56
1:A:2719:CYS:O	1:A:2723:LYS:N	2.39	0.56
1:A:5070:ASP:OD1	1:A:5070:ASP:N	2.35	0.56
1:A:996:GLN:OE1	1:A:996:GLN:N	2.36	0.55
1:A:1468:LEU:HA	1:A:1471:LYS:HG3	1.88	0.55
1:A:2129:TYR:HE2	1:A:2153:GLY:HA3	1.71	0.55
1:A:2716:MET:HG2	1:A:2743:VAL:HG11	1.88	0.55
1:A:3486:GLN:NE2	1:A:4998:ARG:O	2.39	0.55
1:A:3658:SER:HB3	1:A:3720:LEU:HD11	1.87	0.55
1:A:2491:HIS:CE1	1:A:2526:VAL:HG23	2.41	0.55
1:A:3342:ASP:N	1:A:3342:ASP:OD1	2.37	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3726:SER:OG	1:A:3728:GLU:OE1	2.24	0.55
1:A:4407:ILE:HG23	1:A:4408:LEU:HD12	1.88	0.55
1:A:4552:ILE:HG22	1:A:4554:PRO:HD2	1.88	0.55
1:A:1558:MET:SD	1:A:1559:SER:N	2.80	0.55
1:A:2402:VAL:HG12	1:A:2404:ALA:H	1.71	0.55
1:A:2866:PRO:HG3	1:A:2914:LEU:HD11	1.87	0.55
1:A:3191:GLN:HB3	1:A:3195:ARG:HH11	1.71	0.55
1:A:4098:ASP:N	1:A:4098:ASP:OD1	2.40	0.55
1:A:4816:ARG:HE	1:A:4921:THR:HG21	1.72	0.55
1:A:5034:LEU:HD21	1:A:5140:THR:HG22	1.88	0.55
1:A:5060:LEU:HD13	1:A:5134:VAL:HG23	1.89	0.55
1:A:649:LEU:HD22	1:A:671:LEU:HD22	1.88	0.55
1:A:2022:THR:O	1:A:2025:GLN:NE2	2.40	0.55
1:A:2195:PHE:CZ	1:A:2276:MET:HE3	2.40	0.55
1:A:2752:ALA:O	1:A:2758:ARG:NH2	2.40	0.55
1:A:3410:MET:SD	1:A:3410:MET:N	2.80	0.55
1:A:4968:LEU:O	1:A:4972:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:646:ARG:NH2	1:A:674:CYS:SG	2.79	0.55
1:A:1151:ASP:OD1	1:A:1231:LYS:NZ	2.40	0.55
1:A:1499:LEU:HD23	1:A:1551:LEU:HD21	1.88	0.55
1:A:2491:HIS:ND1	1:A:2495:MET:SD	2.80	0.55
1:A:3696:VAL:O	1:A:3700:GLN:NE2	2.40	0.55
1:A:3743:GLU:HB2	1:A:3805:GLU:HA	1.88	0.55
1:A:940:GLN:HE22	1:A:3241:GLN:HG2	1.72	0.55
1:A:1803:LEU:HD21	1:A:1826:LEU:HD21	1.87	0.55
1:A:3932:LYS:NZ	1:A:4015:CYS:SG	2.71	0.55
1:A:4328:LEU:HD13	1:A:4337:HIS:HB3	1.89	0.55
1:A:4338:PRO:HA	1:A:4342:GLN:HB2	1.89	0.55
1:A:5035:ARG:HH11	1:A:5143:TRP:CD1	2.25	0.55
1:A:3205:LEU:HA	1:A:3208:LYS:HG2	1.88	0.55
1:A:4378:ILE:HG22	1:A:4386:LYS:HE2	1.87	0.55
1:A:1639:CYS:O	1:A:1643:GLU:HG3	2.07	0.55
1:A:2081:LEU:O	1:A:2085:LEU:HD22	2.07	0.55
1:A:2142:ASP:OD1	1:A:2142:ASP:N	2.38	0.55
1:A:2162:PHE:HB3	1:A:2176:LEU:HD12	1.89	0.55
1:A:3004:VAL:HG23	1:A:3110:ILE:HA	1.89	0.55
1:A:3544:ARG:HA	1:A:3547:LYS:HB2	1.88	0.55
1:A:3974:TRP:O	1:A:3979:GLN:NE2	2.38	0.55
1:A:777:LYS:NZ	1:A:827:ASN:O	2.40	0.55
1:A:1015:GLY:C	1:A:1017:PRO:HD3	2.32	0.55
1:A:5020:ALA:O	1:A:5023:GLN:HG2	2.07	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1155:ILE:HG23	1:A:1186:HIS:CD2	2.42	0.54
1:A:1596:MET:O	1:A:1596:MET:HG3	2.06	0.54
1:A:1820:THR:OG1	1:A:1822:ASP:OD1	2.22	0.54
1:A:3283:LEU:H	1:A:3283:LEU:HD23	1.72	0.54
1:A:778:ILE:HD13	1:A:784:LYS:HZ1	1.70	0.54
1:A:1065:VAL:O	1:A:1069:VAL:HG22	2.07	0.54
1:A:1978:GLU:HG2	1:A:1980:VAL:H	1.71	0.54
1:A:4691:THR:HG22	1:A:4693:GLU:H	1.72	0.54
1:A:2154:SER:OG	1:A:2157:GLU:OE1	2.25	0.54
1:A:3809:ASP:OD2	1:A:3851:TYR:OH	2.20	0.54
1:A:4080:ILE:HD13	1:A:4107:LEU:HD22	1.89	0.54
1:A:4256:PRO:HG2	1:A:4259:VAL:HB	1.88	0.54
1:A:3361:ILE:HD13	1:A:3371:VAL:HG11	1.89	0.54
1:A:693:ALA:HB1	1:A:733:SER:HA	1.90	0.54
1:A:1077:THR:HA	1:A:1168:LEU:HD23	1.88	0.54
1:A:2486:ASN:HB2	1:A:2529:VAL:HG11	1.90	0.54
1:A:3873:ILE:HA	1:A:3876:ILE:HD12	1.88	0.54
1:A:4794:LEU:HD12	1:A:4798:TYR:HD2	1.72	0.54
1:A:1029:LEU:HA	1:A:1092:GLN:HG2	1.90	0.54
1:A:1983:LYS:HD3	1:A:2004:PHE:HE1	1.72	0.54
1:A:2373:CYS:SG	1:A:2375:ILE:HG12	2.48	0.54
1:A:3591:ARG:HG3	1:A:3659:TRP:NE1	2.22	0.54
1:A:1952:THR:OG1	1:A:2063:GLN:OE1	2.25	0.54
1:A:2404:ALA:HB2	1:A:2439:HIS:CE1	2.43	0.54
1:A:2717:VAL:HG13	1:A:2718:ILE:HD13	1.90	0.54
1:A:1552:LEU:HA	1:A:1555:LEU:HD11	1.88	0.54
1:A:2295:ASN:HD21	1:A:2298:ASN:HD21	1.54	0.54
1:A:3017:GLN:HE22	1:A:3191:GLN:HG2	1.72	0.54
1:A:3597:LEU:HD23	1:A:3607:VAL:HG13	1.90	0.54
1:A:2275:THR:C	1:A:2276:MET:HE2	2.33	0.54
1:A:2290:TYR:HA	1:A:2309:LYS:HD3	1.90	0.54
1:A:2672:PHE:HD2	1:A:2676:TYR:HB2	1.72	0.54
1:A:542:ASP:N	1:A:542:ASP:OD1	2.41	0.54
1:A:637:PRO:HA	1:A:640:ARG:HG2	1.89	0.54
1:A:2627:LEU:HD13	1:A:2635:HIS:HB3	1.90	0.54
1:A:4414:LEU:HD23	1:A:4421:MET:HG3	1.90	0.54
1:A:984:THR:HG21	1:A:3203:GLU:HG3	1.89	0.53
1:A:3863:ILE:HA	1:A:3866:VAL:HG22	1.89	0.53
1:A:646:ARG:NH2	1:A:674:CYS:O	2.41	0.53
1:A:676:GLN:OE1	1:A:676:GLN:N	2.36	0.53
1:A:2182:PHE:HZ	1:A:2219:MET:HG3	1.73	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2964:LEU:HB3	1:A:2967:ALA:HB3	1.89	0.53
1:A:3262:HIS:ND1	1:A:3374:TYR:OH	2.26	0.53
1:A:4062:GLU:HB3	1:A:4110:LYS:HD3	1.90	0.53
1:A:4067:LEU:HD21	1:A:4084:LEU:HG	1.90	0.53
1:A:2332:TYR:O	1:A:2336:GLU:HG2	2.08	0.53
1:A:2361:MET:O	1:A:2365:LEU:HD23	2.07	0.53
1:A:3003:LEU:HD12	1:A:3128:LEU:HG	1.90	0.53
1:A:3142:TRP:CE2	1:A:3201:LEU:HD11	2.44	0.53
1:A:4406:GLN:HG3	1:A:4607:PHE:HE1	1.72	0.53
1:A:4726:PHE:CD1	1:A:4774:ILE:HG21	2.43	0.53
1:A:513:LEU:HD22	1:A:516:TRP:HZ3	1.74	0.53
1:A:753:TYR:HE2	1:A:760:ARG:HE	1.57	0.53
1:A:1880:ARG:HD3	1:A:5145:ARG:HG3	1.90	0.53
1:A:3369:ASP:OD1	1:A:3369:ASP:N	2.41	0.53
1:A:4164:GLN:HG3	1:A:4169:ILE:HG22	1.91	0.53
1:A:5002:GLN:HG2	1:A:5003:THR:H	1.73	0.53
1:A:1852:LYS:HB2	1:A:1854:TYR:HE1	1.74	0.53
1:A:2584:GLN:O	1:A:2588:ARG:HG2	2.08	0.53
1:A:2729:VAL:HG22	1:A:2862:SER:HA	1.89	0.53
1:A:3188:VAL:HG11	1:A:3217:LEU:HD21	1.89	0.53
1:A:3324:TRP:CH2	1:A:3371:VAL:HG13	2.43	0.53
1:A:510:PHE:CE1	1:A:601:MET:HE1	2.43	0.53
1:A:894:LEU:HA	1:A:903:LEU:HA	1.89	0.53
1:A:1749:VAL:HG12	1:A:1750:TYR:HD1	1.73	0.53
1:A:2548:ASP:HA	1:A:2551:GLU:HB2	1.90	0.53
1:A:796:HIS:O	1:A:800:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:1303:VAL:HA	1:A:1306:ILE:HD12	1.90	0.53
1:A:348:VAL:HG23	1:A:409:ARG:HG2	1.91	0.53
1:A:2007:GLU:HB3	1:A:2009:TYR:HD1	1.74	0.53
1:A:3188:VAL:HG21	1:A:3217:LEU:HD22	1.90	0.53
1:A:4104:LEU:HD13	1:A:4124:PHE:HE2	1.72	0.53
1:A:358:ARG:NH1	1:A:396:ASP:OD1	2.42	0.52
1:A:1373:ILE:HG23	1:A:1374:SER:H	1.73	0.52
1:A:507:ASP:HA	1:A:510:PHE:HD2	1.74	0.52
1:A:849:LEU:HD22	1:A:870:VAL:HG23	1.91	0.52
1:A:1730:LEU:HG	1:A:1739:LYS:HB2	1.91	0.52
1:A:1787:LEU:HD12	1:A:1793:ASN:HB3	1.91	0.52
1:A:2028:ILE:HD12	1:A:2028:ILE:H	1.75	0.52
1:A:3157:PHE:HD1	1:A:3176:VAL:HG21	1.74	0.52
1:A:3223:PRO:O	1:A:3226:VAL:HG12	2.08	0.52
1:A:3702:PRO:HG2	1:A:3705:GLN:HG3	1.91	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3859:THR:O	1:A:3863:ILE:HG23	2.09	0.52
1:A:508:ARG:O	1:A:512:VAL:HG23	2.10	0.52
1:A:1312:LEU:HD21	1:A:1344:PHE:CZ	2.45	0.52
1:A:1656:LYS:HG2	1:A:1761:LEU:HB3	1.91	0.52
1:A:4988:ASP:HA	1:A:5014:GLN:HA	1.91	0.52
1:A:1503:ILE:HD12	1:A:1530:LEU:HD13	1.91	0.52
1:A:3519:ARG:HD2	1:A:3598:LEU:HD12	1.91	0.52
1:A:1649:TRP:HA	1:A:1652:VAL:HG12	1.92	0.52
1:A:2517:LEU:HD12	1:A:2518:GLY:N	2.25	0.52
1:A:4512:GLY:HA2	1:A:4781:ALA:HA	1.92	0.52
1:A:2950:GLY:O	1:A:3117:TYR:OH	2.28	0.52
1:A:3267:HIS:CD2	1:A:3370:PHE:HE2	2.28	0.52
1:A:3516:ASP:N	1:A:3516:ASP:OD1	2.41	0.52
1:A:4303:LEU:HB3	1:A:4313:GLN:HE21	1.73	0.52
1:A:2975:THR:O	1:A:2979:ILE:HG12	2.09	0.52
1:A:3012:LEU:HD11	1:A:3062:LEU:HD21	1.91	0.52
1:A:3549:TRP:H	1:A:3549:TRP:CD1	2.26	0.52
1:A:4104:LEU:HD12	1:A:4107:LEU:HD11	1.92	0.52
1:A:4427:PRO:HA	1:A:4617:ARG:HE	1.73	0.52
1:A:772:LEU:HA	1:A:775:LEU:HD23	1.92	0.52
1:A:831:ASN:O	1:A:832:HIS:ND1	2.43	0.52
1:A:1419:ASP:OD1	1:A:3100:ARG:NH2	2.43	0.52
1:A:1550:GLU:O	1:A:1554:LYS:HG3	2.10	0.52
1:A:1844:LEU:HD11	1:A:1874:PHE:HE1	1.75	0.52
1:A:1959:GLY:HA2	2:A:5201:ATP:O2A	2.10	0.52
1:A:2422:TYR:HD1	1:A:2468:VAL:HG23	1.74	0.52
1:A:2573:THR:HA	1:A:2576:ILE:HD12	1.91	0.52
1:A:4741:PHE:CG	1:A:4741:PHE:O	2.62	0.52
1:A:1049:ASP:OD1	1:A:1049:ASP:N	2.43	0.52
1:A:373:GLY:O	1:A:382:TRP:N	2.30	0.52
1:A:1832:THR:HG21	1:A:2044:ILE:HG21	1.91	0.52
1:A:1876:SER:O	1:A:1880:ARG:HG2	2.10	0.52
1:A:2167:GLY:HA3	1:A:2221:ARG:NH1	2.25	0.52
1:A:2622:GLU:HG3	1:A:2756:LEU:CD2	2.40	0.52
1:A:3382:MET:HE2	1:A:4961:TYR:CD2	2.45	0.52
1:A:3652:TYR:O	1:A:3652:TYR:CG	2.63	0.52
1:A:1929:TYR:OH	1:A:2037:ILE:HD13	2.09	0.51
1:A:2119:GLU:HB3	1:A:2125:PHE:CE1	2.45	0.51
1:A:2129:TYR:CE2	1:A:2153:GLY:HA3	2.44	0.51
1:A:2430:ARG:HA	1:A:2433:PHE:CD2	2.45	0.51
1:A:3713:TYR:HA	1:A:3716:ASP:OD2	2.10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4233:SER:HB3	1:A:4661:ILE:HD12	1.91	0.51
1:A:1528:LEU:HD23	1:A:1548:LEU:HD21	1.93	0.51
1:A:1821:PHE:HB3	1:A:2040:TYR:CG	2.45	0.51
1:A:3252:HIS:ND1	1:A:3400:HIS:O	2.43	0.51
1:A:3281:SER:HB3	1:A:3403:ASP:HA	1.91	0.51
1:A:793:MET:HE3	1:A:793:MET:HA	1.93	0.51
1:A:881:THR:O	1:A:885:LEU:HD12	2.10	0.51
1:A:1049:ASP:O	1:A:1056:ARG:NH2	2.43	0.51
1:A:1124:LEU:O	1:A:1128:LYS:HG3	2.10	0.51
1:A:2037:ILE:HD11	1:A:2088:PHE:CE2	2.45	0.51
1:A:3224:ASP:OD2	1:A:3381:ARG:NH1	2.43	0.51
1:A:4508:PRO:HB2	1:A:4565:GLN:HG3	1.93	0.51
1:A:2061:ILE:HD12	1:A:2062:PRO:HD2	1.93	0.51
1:A:3003:LEU:HD11	1:A:3120:PHE:CE2	2.45	0.51
1:A:388:MET:SD	1:A:401:VAL:HB	2.49	0.51
1:A:663:ARG:HA	1:A:716:PHE:CE1	2.46	0.51
1:A:2520:ILE:HD11	1:A:2524:GLN:HB2	1.92	0.51
1:A:3135:MET:HE3	1:A:3135:MET:O	2.10	0.51
1:A:521:LEU:HD11	1:A:600:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:621:LEU:HD22	1:A:667:ILE:HD13	1.91	0.51
1:A:1021:VAL:HG12	1:A:1065:VAL:HG22	1.91	0.51
1:A:1823:GLU:H	1:A:1842:ARG:HH21	1.57	0.51
1:A:2131:TYR:CD2	1:A:2187:LEU:HD13	2.45	0.51
1:A:2342:LEU:HD11	1:A:2364:ILE:HD11	1.92	0.51
1:A:2569:ASN:HB3	1:A:2572:GLU:HB2	1.93	0.51
1:A:2711:GLU:O	1:A:2715:MET:HG2	2.11	0.51
1:A:4544:ASN:OD1	1:A:4544:ASN:O	2.28	0.51
1:A:1966:THR:HA	1:A:1969:THR:HG22	1.93	0.51
1:A:2315:LEU:HG	1:A:2320:VAL:HB	1.93	0.51
1:A:4388:THR:O	1:A:4391:GLU:HG3	2.11	0.51
1:A:4562:PHE:O	1:A:4566:HIS:ND1	2.39	0.51
1:A:1253:TYR:OH	1:A:1288:CYS:HA	2.10	0.51
1:A:1277:TYR:O	1:A:1281:LYS:N	2.41	0.51
1:A:1295:GLN:NE2	1:A:1299:ILE:HG12	2.26	0.51
1:A:1375:GLU:HB3	1:A:1376:PRO:HD3	1.93	0.51
1:A:3200:ASP:N	1:A:3200:ASP:OD1	2.44	0.51
1:A:3382:MET:HB3	1:A:5036:LEU:HG	1.93	0.51
1:A:4729:GLU:HG2	1:A:4771:ARG:HH11	1.76	0.51
1:A:1495:SER:HB3	1:A:1498:SER:H	1.76	0.51
1:A:683:ASN:OD1	1:A:684:SER:N	2.43	0.50
1:A:1056:ARG:HA	1:A:1059:MET:HE3	1.92	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2168:LEU:HD23	1:A:2168:LEU:H	1.76	0.50
1:A:1150:VAL:HA	1:A:1232:VAL:O	2.12	0.50
1:A:2196:CYS:SG	1:A:2197:LYS:HE2	2.51	0.50
1:A:3360:GLU:O	1:A:3364:THR:N	2.44	0.50
1:A:3493:ARG:HH22	1:A:4927:ASP:HB2	1.75	0.50
1:A:822:HIS:CE1	1:A:881:THR:HG23	2.47	0.50
1:A:1400:ASP:OD2	1:A:1401:ILE:N	2.39	0.50
1:A:1913:VAL:HG12	1:A:1913:VAL:O	2.12	0.50
1:A:2250:LEU:HD12	1:A:2488:TYR:HB3	1.92	0.50
1:A:2367:ILE:HD11	1:A:2543:PHE:HZ	1.75	0.50
1:A:991:SER:O	1:A:991:SER:OG	2.27	0.50
1:A:2938:GLN:O	1:A:2942:HIS:ND1	2.33	0.50
1:A:3007:ARG:N	1:A:3134:ASP:OD1	2.42	0.50
1:A:3847:CYS:HB2	1:A:3867:ARG:CG	2.42	0.50
1:A:4016:ASN:O	1:A:4020:VAL:HG12	2.11	0.50
1:A:729:TYR:HD2	1:A:732:ARG:HD2	1.77	0.50
1:A:939:LYS:HE3	1:A:3153:TRP:CD1	2.47	0.50
1:A:955:CYS:HB3	1:A:997:LYS:NZ	2.26	0.50
1:A:1781:ARG:NH2	1:A:1817:PRO:O	2.26	0.50
1:A:1880:ARG:HH22	1:A:5149:GLY:HA3	1.76	0.50
1:A:3340:PHE:HD2	1:A:3379:LEU:HD21	1.77	0.50
1:A:4709:PRO:O	1:A:4713:HIS:ND1	2.44	0.50
1:A:886:ARG:HD3	1:A:3240:LYS:HB2	1.93	0.50
1:A:1031:TRP:CD1	1:A:1033:ASP:H	2.27	0.50
1:A:1418:ASN:OD1	1:A:1419:ASP:N	2.45	0.50
1:A:2413:HIS:NE2	1:A:2819:LYS:O	2.43	0.50
1:A:2456:VAL:HA	1:A:2459:ILE:HD12	1.92	0.50
1:A:2737:SER:N	2:A:5205:ATP:O1B	2.43	0.50
1:A:2931:SER:HB2	1:A:2933:ARG:HD3	1.93	0.50
1:A:3313:THR:HG23	1:A:3316:SER:H	1.77	0.50
1:A:4165:GLU:OE2	1:A:4674:GLN:NE2	2.45	0.50
1:A:2488:TYR:OH	1:A:2532:LEU:HB2	2.12	0.50
1:A:3314:GLU:HG3	1:A:3318:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:3842:PRO:HA	1:A:3845:LEU:HD12	1.94	0.50
1:A:5117:GLU:HG2	1:A:5118:VAL:HG13	1.94	0.50
1:A:740:LEU:HD11	1:A:771:ARG:HD2	1.94	0.50
1:A:1031:TRP:HB3	1:A:1034:VAL:HG12	1.94	0.50
1:A:1567:ASN:HA	1:A:1570:VAL:HG12	1.94	0.50
1:A:2037:ILE:HD11	1:A:2088:PHE:HE2	1.76	0.50
1:A:2559:VAL:O	1:A:2563:VAL:HB	2.12	0.50
1:A:2843:VAL:HG12	1:A:2845:ILE:HG13	1.93	0.50

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3494:ASP:HB2	1:A:3498:SER:HG	1.76	0.50
1:A:3709:LEU:HD21	1:A:3761:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:3745:GLN:NE2	1:A:3758:PRO:O	2.43	0.50
1:A:4530:ARG:NH2	1:A:4573:GLN:HE21	2.09	0.50
1:A:687:GLN:CG	1:A:688:PRO:HD2	2.42	0.50
1:A:910:ALA:HA	1:A:913:ARG:HB2	1.94	0.50
1:A:1006:ILE:HD12	1:A:1037:LEU:HD21	1.93	0.50
1:A:1129:GLN:HG3	1:A:1133:TYR:CE2	2.47	0.50
1:A:1590:LEU:HD13	1:A:1598:PHE:HE2	1.76	0.50
1:A:1803:LEU:HD22	1:A:2033:PHE:CE1	2.47	0.50
1:A:2926:ALA:HA	1:A:2929:LYS:HG2	1.93	0.50
1:A:4190:ASP:OD1	1:A:4235:GLN:NE2	2.44	0.50
1:A:792:LYS:HA	1:A:795:MET:HE3	1.94	0.49
1:A:1520:ILE:HG12	1:A:1591:HIS:CE1	2.47	0.49
1:A:4409:LYS:HD3	1:A:4412:ARG:HH22	1.76	0.49
1:A:4431:GLU:OE1	1:A:4519:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:4581:SER:O	1:A:4585:THR:HG23	2.12	0.49
1:A:5044:ILE:HD11	1:A:5049:LYS:HD3	1.94	0.49
1:A:784:LYS:O	1:A:788:GLU:HG2	2.11	0.49
1:A:1140:GLN:NE2	1:A:1200:LEU:HD12	2.27	0.49
1:A:2162:PHE:O	1:A:2166:CYS:HB3	2.11	0.49
1:A:998:PHE:CE2	1:A:1002:LEU:HD11	2.48	0.49
1:A:1269:ILE:HG13	1:A:1270:PHE:CD1	2.48	0.49
1:A:1739:LYS:HA	1:A:1742:VAL:HG22	1.93	0.49
1:A:2593:GLU:CD	1:A:2596:PHE:HA	2.37	0.49
1:A:1568:THR:HA	1:A:1571:GLU:OE2	2.12	0.49
1:A:2678:SER:OG	1:A:2679:SER:N	2.45	0.49
1:A:3423:SER:OG	1:A:3532:HIS:CE1	2.65	0.49
1:A:3879:PHE:O	1:A:3882:HIS:ND1	2.41	0.49
1:A:4699:VAL:HG11	1:A:4715:LEU:HD21	1.93	0.49
1:A:5055:GLN:O	1:A:5059:LEU:HG	2.12	0.49
1:A:664:TRP:O	1:A:667:ILE:HG22	2.13	0.49
1:A:1255:ASN:OD1	1:A:1261:ILE:HG22	2.12	0.49
1:A:2945:LEU:HB3	1:A:2978:LEU:HD21	1.94	0.49
1:A:3303:PRO:HB3	1:A:3333:VAL:HG12	1.95	0.49
1:A:2508:VAL:O	1:A:2523:ARG:NH1	2.45	0.49
1:A:2748:GLN:O	1:A:2752:ALA:HB2	2.13	0.49
1:A:5045:ASP:OD1	1:A:5045:ASP:N	2.45	0.49
1:A:2189:ASP:HB2	1:A:2269:PHE:HD2	1.78	0.49
1:A:3017:GLN:NE2	1:A:3191:GLN:HG2	2.27	0.49
1:A:3409:ILE:HG23	1:A:3476:ASP:HB2	1.93	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:5116:SER:O	1:A:5120:SER:OG	2.31	0.49
1:A:3094:THR:HA	1:A:3096:ARG:HH12	1.78	0.49
1:A:1429:HIS:NE2	1:A:1433:GLN:OE1	2.46	0.49
1:A:3271:ARG:HG3	1:A:3365:GLN:HE22	1.75	0.49
1:A:3572:LYS:O	1:A:3575:GLN:HG3	2.13	0.49
1:A:3789:LEU:HA	1:A:3792:LEU:HG	1.94	0.49
1:A:3975:LEU:HD23	1:A:3993:PHE:HD2	1.78	0.49
1:A:4403:GLY:HA3	1:A:4408:LEU:HD22	1.95	0.49
1:A:775:LEU:HD12	1:A:776:ARG:O	2.13	0.49
1:A:1558:MET:HE1	1:A:1561:LYS:HB2	1.95	0.49
1:A:1825:LEU:HB2	1:A:1839:LEU:HD22	1.94	0.49
1:A:1828:THR:O	1:A:1831:THR:OG1	2.19	0.49
1:A:1852:LYS:HB2	1:A:1854:TYR:CE1	2.48	0.49
1:A:2269:PHE:HA	1:A:2276:MET:SD	2.53	0.49
1:A:2526:VAL:HG13	1:A:2527:TYR:CD1	2.48	0.49
1:A:3402:ASP:OD1	1:A:3402:ASP:N	2.46	0.49
1:A:350:VAL:HG13	1:A:464:TRP:HD1	1.77	0.48
1:A:1510:VAL:HB	1:A:1527:ARG:HG2	1.95	0.48
1:A:2719:CYS:HB2	1:A:2724:ILE:O	2.13	0.48
1:A:3919:ARG:HG3	1:A:3920:PRO:HD3	1.93	0.48
1:A:3969:ARG:O	1:A:3972:GLN:HG3	2.13	0.48
1:A:4420:ASN:C	1:A:4421:MET:HE2	2.38	0.48
1:A:905:TYR:O	1:A:908:GLU:N	2.47	0.48
1:A:1456:GLN:HA	1:A:1459:TRP:CE3	2.48	0.48
1:A:1674:LEU:HD21	1:A:1690:MET:HE3	1.95	0.48
1:A:3258:PHE:HZ	1:A:3397:ARG:HH21	1.61	0.48
1:A:3351:ALA:HA	1:A:3354:LYS:NZ	2.28	0.48
1:A:591:LYS:HZ1	1:A:622:ILE:HB	1.78	0.48
1:A:1373:ILE:HG13	1:A:1459:TRP:HZ2	1.78	0.48
1:A:1848:SER:OG	1:A:1852:LYS:NZ	2.43	0.48
1:A:2491:HIS:NE2	1:A:2526:VAL:HA	2.28	0.48
1:A:2655:HIS:CE1	1:A:2661:LYS:HB3	2.34	0.48
1:A:2726:LEU:O	1:A:2844:GLY:N	2.41	0.48
1:A:3333:VAL:HG22	1:A:3372:PHE:HB2	1.95	0.48
1:A:4525:VAL:HG13	1:A:4628:LEU:HD12	1.95	0.48
1:A:5055:GLN:CD	1:A:5055:GLN:H	2.21	0.48
1:A:946:GLN:HE21	1:A:947:ILE:HG13	1.78	0.48
1:A:1144:VAL:HB	1:A:1213:TRP:CZ2	2.49	0.48
1:A:1715:ASP:O	1:A:1719:LEU:HG	2.13	0.48
1:A:1942:PHE:HB2	1:A:2056:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:4708:VAL:HG22	1:A:4711:LEU:HB2	1.95	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1002:LEU:HA	1:A:1005:VAL:HG12	1.95	0.48
1:A:4941:MET:HE1	1:A:4978:LEU:HG	1.95	0.48
1:A:1189:LEU:HB2	1:A:1193:ILE:HD12	1.96	0.48
1:A:2007:GLU:HB3	1:A:2009:TYR:CD1	2.48	0.48
1:A:2652:VAL:HG13	1:A:2715:MET:HE1	1.96	0.48
1:A:2855:MET:HB2	1:A:2860:PHE:CZ	2.48	0.48
1:A:3348:GLN:OE1	1:A:3348:GLN:N	2.32	0.48
1:A:3689:PHE:O	1:A:3692:THR:HG22	2.14	0.48
1:A:3855:SER:O	1:A:3860:ARG:NH1	2.46	0.48
1:A:4400:LEU:HD11	1:A:4411:LEU:HG	1.95	0.48
1:A:1596:MET:HE2	1:A:1596:MET:HB2	1.79	0.48
1:A:2465:ASP:OD1	1:A:2465:ASP:N	2.47	0.48
1:A:2489:ARG:HH11	1:A:2596:PHE:HE1	1.61	0.48
1:A:4125:ILE:HG21	1:A:4182:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:1377:ARG:NH2	1:A:1455:LEU:HD22	2.26	0.48
1:A:1383:GLU:HA	1:A:1386:ARG:HE	1.78	0.48
1:A:2558:ILE:HG22	1:A:2606:VAL:HG21	1.96	0.48
1:A:3772:ARG:HG3	1:A:3773:THR:N	2.28	0.48
1:A:3795:ALA:HB2	1:A:3811:PHE:CE2	2.49	0.48
1:A:4270:MET:SD	1:A:4272:ARG:NH2	2.87	0.48
1:A:767:GLY:O	1:A:771:ARG:HG2	2.14	0.48
1:A:778:ILE:HG21	1:A:784:LYS:NZ	2.29	0.48
1:A:1002:LEU:HD22	1:A:1037:LEU:HD13	1.96	0.48
1:A:2041:LEU:HD23	1:A:2049:TRP:CD1	2.46	0.48
1:A:4711:LEU:HD11	1:A:4900:GLN:HA	1.95	0.48
1:A:735:LEU:HD22	1:A:771:ARG:HH22	1.79	0.48
1:A:1528:LEU:HD12	1:A:1529:LEU:H	1.79	0.48
1:A:1665:PHE:HE1	1:A:1822:ASP:HB3	1.79	0.48
1:A:2035:LEU:HD13	1:A:2041:LEU:HD21	1.95	0.48
1:A:2331:ARG:HD2	1:A:2334:LYS:HD2	1.96	0.48
1:A:4780:ASN:HA	1:A:4783:ARG:HG2	1.96	0.48
1:A:1082:GLN:O	1:A:1086:ILE:HG23	2.14	0.47
1:A:1660:HIS:CG	1:A:1765:GLY:HA3	2.49	0.47
1:A:1662:TYR:O	1:A:1665:PHE:HB2	2.13	0.47
1:A:2852:PRO:HA	1:A:2860:PHE:CZ	2.48	0.47
1:A:2990:SER:OG	1:A:2995:ASP:OD2	2.31	0.47
1:A:4003:LYS:O	1:A:4006:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:4201:LEU:HB3	1:A:4205:LYS:HB2	1.96	0.47
1:A:565:HIS:O	1:A:568:LYS:HG2	2.14	0.47
1:A:1127:LEU:O	1:A:1130:GLU:HG2	2.14	0.47
1:A:1645:PHE:CD1	1:A:1744:MET:HE2	2.49	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2143:THR:OG1	1:A:2145:GLN:OE1	2.23	0.47
1:A:2295:ASN:HB3	1:A:2300:LYS:HE3	1.97	0.47
1:A:2432:ALA:HB1	1:A:2478:GLY:O	2.14	0.47
1:A:2742:ILE:HA	1:A:2745:ASP:OD1	2.14	0.47
1:A:2794:ASP:OD1	1:A:2797:GLN:N	2.47	0.47
1:A:3185:CYS:HA	1:A:3188:VAL:HG12	1.96	0.47
1:A:4322:TYR:CZ	1:A:4394:VAL:HG11	2.49	0.47
1:A:4695:LEU:HD11	1:A:4876:ILE:HD11	1.96	0.47
1:A:938:LEU:HD13	1:A:971:CYS:HB2	1.97	0.47
1:A:1114:ARG:HD3	1:A:1115:SER:N	2.29	0.47
1:A:1880:ARG:HH11	1:A:5145:ARG:HG3	1.80	0.47
1:A:2029:PRO:HA	1:A:2084:PHE:HE2	1.79	0.47
1:A:2364:ILE:HG13	1:A:2394:LEU:HD22	1.97	0.47
1:A:2526:VAL:HG21	1:A:2596:PHE:CE2	2.49	0.47
1:A:2532:LEU:HD23	1:A:2537:ILE:HD13	1.96	0.47
1:A:2716:MET:HA	1:A:2719:CYS:SG	2.55	0.47
1:A:3224:ASP:OD1	1:A:3225:ALA:N	2.46	0.47
1:A:3284:LEU:N	1:A:3337:GLN:OE1	2.47	0.47
1:A:3977:PRO:HG2	1:A:3979:GLN:HG2	1.96	0.47
1:A:4125:ILE:HD13	1:A:4182:ARG:HH12	1.78	0.47
1:A:4178:VAL:HA	1:A:4181:VAL:HG22	1.97	0.47
1:A:3041:GLN:NE2	1:A:3045:ASN:OD1	2.47	0.47
1:A:3072:TYR:O	1:A:3076:ASN:N	2.48	0.47
1:A:716:PHE:HE2	1:A:720:LYS:HG3	1.78	0.47
1:A:1677:GLU:HG2	1:A:1687:ALA:HB3	1.95	0.47
1:A:1679:ARG:HD2	1:A:1679:ARG:HA	1.63	0.47
1:A:2660:GLU:HG2	1:A:2663:SER:OG	2.13	0.47
1:A:3478:THR:OG1	1:A:3482:GLN:OE1	2.28	0.47
1:A:3553:GLU:HB2	1:A:3573:ARG:HD2	1.97	0.47
1:A:4129:GLU:HA	1:A:4132:VAL:HG22	1.96	0.47
1:A:4379:ARG:NH2	1:A:4558:ASP:OD2	2.48	0.47
1:A:614:LEU:HA	1:A:617:LEU:HG	1.96	0.47
1:A:3341:ASP:OD1	1:A:3384:SER:OG	2.24	0.47
1:A:3605:ALA:HA	1:A:3608:GLN:NE2	2.29	0.47
1:A:4221:ASN:O	1:A:4224:HIS:ND1	2.36	0.47
1:A:4992:TYR:O	1:A:4996:VAL:HB	2.15	0.47
1:A:1143:ARG:HD2	1:A:1213:TRP:CZ3	2.49	0.47
1:A:1312:LEU:HD21	1:A:1344:PHE:HZ	1.80	0.47
1:A:1677:GLU:HG2	1:A:1687:ALA:CB	2.44	0.47
1:A:1982:LEU:HD12	1:A:2015:ILE:O	2.15	0.47
1:A:2455:ALA:HB1	1:A:2458:CYS:SG	2.53	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2463:LEU:HD12	1:A:2464:CYS:N	2.30	0.47
1:A:2993:GLY:O	1:A:2994:LEU:HG	2.15	0.47
1:A:3912:ASP:N	1:A:3912:ASP:OD1	2.47	0.47
1:A:4431:GLU:OE2	1:A:4617:ARG:NH1	2.47	0.47
1:A:4508:PRO:HG3	1:A:4566:HIS:CD2	2.50	0.47
1:A:682:LYS:HA	1:A:766:GLN:HE22	1.80	0.47
1:A:2217:ILE:O	1:A:2221:ARG:HG2	2.14	0.47
1:A:2551:GLU:HG3	1:A:2599:LEU:HD21	1.97	0.47
1:A:2615:HIS:O	1:A:2619:LEU:HD23	2.14	0.47
1:A:3277:ILE:CG2	1:A:3376:VAL:HG12	2.45	0.47
1:A:4866:TYR:HB3	1:A:4907:PHE:CE1	2.49	0.47
1:A:1051:ILE:O	1:A:1052:THR:OG1	2.29	0.47
1:A:1667:THR:O	1:A:1671:LEU:HD13	2.15	0.47
1:A:1844:LEU:HD11	1:A:1874:PHE:CE1	2.49	0.47
1:A:2494:GLU:HB3	1:A:2592:ASN:ND2	2.30	0.47
1:A:3156:GLU:OE1	1:A:3234:LEU:HD22	2.14	0.47
1:A:3158:ALA:O	1:A:3171:TYR:HB2	2.14	0.47
1:A:3589:ILE:HG13	1:A:3615:TYR:HE1	1.79	0.47
1:A:4238:MET:HE3	1:A:4270:MET:SD	2.55	0.47
1:A:4519:ARG:H	1:A:4519:ARG:HD3	1.80	0.47
1:A:5064:LEU:HB3	1:A:5141:ARG:NH1	2.30	0.47
1:A:668:LEU:HB3	1:A:672:HIS:CE1	2.50	0.47
1:A:687:GLN:HB3	1:A:691:THR:OG1	2.15	0.47
1:A:942:PRO:HG2	1:A:945:LEU:HB3	1.97	0.47
1:A:1719:LEU:HD22	1:A:1753:ALA:HB2	1.97	0.47
1:A:2923:MET:HG3	1:A:2927:LYS:HE2	1.98	0.47
1:A:3645:MET:HB3	1:A:3720:LEU:HD23	1.97	0.47
1:A:1192:ASP:O	1:A:1195:GLU:HG3	2.15	0.46
1:A:1262:THR:N	1:A:1265:GLU:OE2	2.42	0.46
1:A:1890:ILE:HD12	1:A:1905:PHE:CE2	2.50	0.46
1:A:4958:LEU:O	1:A:5028:HIS:NE2	2.38	0.46
1:A:351:TYR:HE1	1:A:463:ASP:HB3	1.80	0.46
1:A:1152:PHE:HA	1:A:1234:LEU:HD11	1.98	0.46
1:A:1375:GLU:O	1:A:1378:GLN:NE2	2.48	0.46
1:A:2969:TYR:CZ	1:A:2971:GLU:HB2	2.51	0.46
1:A:3501:ARG:HB3	1:A:3504:ARG:HB2	1.97	0.46
1:A:5002:GLN:N	1:A:5002:GLN:OE1	2.49	0.46
1:A:5099:LEU:HD22	1:A:5103:LEU:HD13	1.97	0.46
1:A:2041:LEU:N	1:A:2049:TRP:O	2.44	0.46
1:A:2822:HIS:HB2	1:A:2854:LYS:NZ	2.30	0.46
1:A:4053:LEU:HD23	1:A:4061:ARG:HE	1.81	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:455:VAL:HB	1:A:458:SER:HB2	1.98	0.46
1:A:469:ASP:OD2	1:A:498:LYS:NZ	2.48	0.46
1:A:2256:ARG:HB2	1:A:2259:TRP:HE1	1.79	0.46
1:A:2348:ILE:HD11	1:A:2400:GLY:C	2.40	0.46
1:A:4358:ASP:O	1:A:4362:ARG:N	2.38	0.46
1:A:4525:VAL:HG11	1:A:4625:GLU:HA	1.98	0.46
1:A:4738:VAL:HA	1:A:4922:LEU:HD11	1.98	0.46
1:A:1882:HIS:NE2	1:A:1884:GLU:OE1	2.45	0.46
1:A:2646:LEU:O	1:A:2650:ILE:HG22	2.15	0.46
1:A:3277:ILE:HG21	1:A:3376:VAL:HG12	1.98	0.46
1:A:3785:HIS:CE1	1:A:3787:GLN:HB2	2.51	0.46
1:A:3843:LEU:HA	1:A:3846:VAL:HG22	1.98	0.46
1:A:5065:ASN:HA	1:A:5141:ARG:NH2	2.30	0.46
1:A:522:GLN:O	1:A:525:MET:HG3	2.15	0.46
1:A:844:LEU:HD23	1:A:848:LEU:HD23	1.97	0.46
1:A:1252:LEU:HD13	1:A:1255:ASN:HD22	1.79	0.46
1:A:2716:MET:HE3	1:A:2740:LYS:HA	1.98	0.46
1:A:3121:PRO:HB2	1:A:3123:PRO:HD2	1.98	0.46
1:A:3726:SER:OG	1:A:3727:ARG:N	2.49	0.46
1:A:3974:TRP:CH2	1:A:3983:PRO:HG3	2.51	0.46
1:A:780:ASN:OD1	1:A:783:MET:HE3	2.16	0.46
1:A:1585:HIS:CD2	1:A:1589:LYS:HD2	2.51	0.46
1:A:2182:PHE:CZ	1:A:2219:MET:HG3	2.50	0.46
1:A:4713:HIS:HB3	1:A:4717:LYS:NZ	2.31	0.46
1:A:5099:LEU:O	1:A:5103:LEU:HB2	2.16	0.46
1:A:1277:TYR:O	1:A:1281:LYS:HG2	2.15	0.46
1:A:1319:ALA:O	1:A:1322:ILE:HG22	2.16	0.46
1:A:1380:CYS:HB3	1:A:1435:TYR:OH	2.15	0.46
1:A:1566:SER:O	1:A:1569:GLU:HG2	2.15	0.46
1:A:1933:LYS:HZ1	1:A:1934:ARG:HH12	1.63	0.46
1:A:2101:ASP:OD1	1:A:2101:ASP:N	2.46	0.46
1:A:2433:PHE:CE1	1:A:2477:SER:HB2	2.51	0.46
1:A:3279:THR:HG21	1:A:3404:LEU:HG	1.97	0.46
1:A:4946:LEU:HD11	1:A:5021:LEU:HA	1.98	0.46
1:A:5094:ASN:H	1:A:5097:TRP:HE1	1.63	0.46
1:A:506:LEU:HD23	1:A:565:HIS:CD2	2.50	0.46
1:A:689:GLU:OE1	1:A:704:ARG:NH2	2.38	0.46
1:A:764:CYS:O	1:A:768:ILE:HG12	2.16	0.46
1:A:819:LEU:O	1:A:823:GLU:HG3	2.16	0.46
1:A:2491:HIS:CE1	1:A:2526:VAL:HA	2.50	0.46
1:A:2704:ALA:HB3	2:A:5205:ATP:N1	2.31	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2706:ASN:ND2	1:A:2708:ALA:HB3	2.31	0.46
1:A:2803:VAL:HG22	1:A:2843:VAL:HB	1.98	0.46
1:A:2822:HIS:HB2	1:A:2854:LYS:HZ1	1.81	0.46
1:A:2931:SER:HB2	1:A:2933:ARG:CD	2.46	0.46
1:A:3281:SER:OG	1:A:3282:ARG:N	2.48	0.46
1:A:3932:LYS:HB2	1:A:3932:LYS:HE2	1.42	0.46
1:A:4396:VAL:HG21	1:A:4535:LEU:HD13	1.98	0.46
1:A:590:SER:O	1:A:593:THR:OG1	2.27	0.46
1:A:1699:THR:HG22	1:A:1700:VAL:H	1.79	0.46
1:A:1950:ILE:HD12	1:A:2088:PHE:CD1	2.51	0.46
1:A:3006:THR:O	1:A:3113:LYS:N	2.45	0.46
1:A:3133:LEU:HD23	1:A:3133:LEU:O	2.16	0.46
1:A:3427:LYS:HA	1:A:3532:HIS:CD2	2.51	0.46
1:A:642:ARG:NE	1:A:646:ARG:HH22	2.13	0.45
1:A:950:PHE:CE1	1:A:997:LYS:HE2	2.52	0.45
1:A:1784:PRO:HB2	1:A:1787:LEU:HD23	1.97	0.45
1:A:2464:CYS:SG	1:A:2465:ASP:N	2.89	0.45
1:A:3296:LEU:HB3	1:A:3300:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:3821:LYS:HD2	1:A:3821:LYS:HA	1.77	0.45
1:A:4322:TYR:CE2	1:A:4394:VAL:HG11	2.51	0.45
1:A:4632:LEU:HA	1:A:4635:LEU:HD23	1.97	0.45
1:A:4864:ILE:HG12	1:A:4911:LYS:HE3	1.97	0.45
1:A:884:TRP:HE1	1:A:888:LEU:HD13	1.81	0.45
1:A:1692:SER:OG	1:A:2050:ARG:NH1	2.49	0.45
1:A:2648:MET:SD	1:A:2689:VAL:HG11	2.55	0.45
1:A:4346:VAL:O	1:A:4350:ILE:HG12	2.16	0.45
1:A:642:ARG:HD3	1:A:4765:ARG:HH22	1.81	0.45
1:A:1144:VAL:HG22	1:A:1147:LEU:HB2	1.98	0.45
1:A:1952:THR:O	1:A:2092:THR:HA	2.17	0.45
1:A:2166:CYS:C	1:A:2221:ARG:HH12	2.24	0.45
1:A:2621:LYS:HD2	1:A:2621:LYS:O	2.15	0.45
1:A:3006:THR:HG22	1:A:3133:LEU:O	2.16	0.45
1:A:3268:HIS:ND1	1:A:3268:HIS:O	2.48	0.45
1:A:3736:ALA:HB2	1:A:3808:LEU:HD12	1.98	0.45
1:A:4532:LEU:HA	1:A:4535:LEU:HG	1.98	0.45
1:A:4962:SER:O	1:A:4966:GLU:HG2	2.15	0.45
1:A:507:ASP:O	1:A:510:PHE:HB2	2.16	0.45
1:A:704:ARG:NH2	1:A:736:SER:O	2.45	0.45
1:A:1380:CYS:HA	1:A:1469:PRO:HB3	1.98	0.45
1:A:2417:THR:O	1:A:2420:MET:HG2	2.17	0.45
1:A:2632:ASP:OD1	1:A:2632:ASP:N	2.50	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2911:PHE:CZ	1:A:3130:LYS:HG2	2.52	0.45
1:A:3194:GLU:HA	1:A:3199:ARG:HH12	1.81	0.45
1:A:3955:GLN:O	1:A:3955:GLN:CD	2.60	0.45
1:A:4783:ARG:NH2	1:A:4802:ASP:OD2	2.50	0.45
1:A:4971:ILE:HG23	1:A:5022:TRP:HD1	1.81	0.45
1:A:829:THR:HG23	1:A:834:PHE:HB2	1.98	0.45
1:A:1013:HIS:HB2	1:A:1017:PRO:HG2	1.99	0.45
1:A:1199:LYS:O	1:A:1203:LEU:HD12	2.16	0.45
1:A:3254:SER:OG	1:A:3404:LEU:O	2.31	0.45
1:A:1051:ILE:HG21	1:A:1059:MET:HE1	1.99	0.45
1:A:1085:LEU:HD13	1:A:1089:HIS:HE1	1.81	0.45
1:A:1143:ARG:HB3	1:A:1213:TRP:CH2	2.51	0.45
1:A:3072:TYR:O	1:A:3127:ARG:NH1	2.49	0.45
1:A:3145:SER:O	1:A:3148:GLN:HG3	2.17	0.45
1:A:3346:SER:O	1:A:3346:SER:OG	2.29	0.45
1:A:3525:ARG:O	1:A:3529:MET:HE2	2.16	0.45
1:A:4081:ARG:HD3	1:A:4081:ARG:HA	1.81	0.45
1:A:689:GLU:HG2	1:A:770:TYR:HB3	1.99	0.45
1:A:3604:PRO:HG2	1:A:3607:VAL:HG23	1.98	0.45
1:A:4010:GLN:O	1:A:4014:MET:HG3	2.16	0.45
1:A:4627:LEU:O	1:A:4631:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:664:TRP:HZ3	1:A:698:ILE:HD13	1.82	0.45
1:A:1252:LEU:O	1:A:1256:LEU:HD22	2.16	0.45
1:A:4579:GLY:O	1:A:4688:ARG:HG2	2.17	0.45
1:A:4629:LEU:HA	1:A:4632:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:5002:GLN:HG2	1:A:5003:THR:N	2.32	0.45
1:A:528:PHE:HE2	1:A:604:ALA:HB3	1.82	0.45
1:A:845:ILE:O	1:A:849:LEU:HG	2.17	0.45
1:A:1010:TRP:CZ3	1:A:1016:GLU:HA	2.52	0.45
1:A:1324:GLN:O	1:A:1327:ARG:HG3	2.17	0.45
1:A:1326:ARG:HH22	1:A:1334:ASP:N	2.15	0.45
1:A:1679:ARG:HG2	1:A:1759:LEU:HD12	1.99	0.45
1:A:2360:ASN:O	1:A:2364:ILE:HG22	2.17	0.45
1:A:2885:VAL:O	1:A:2889:ILE:HG12	2.16	0.45
1:A:3016:GLN:HB3	1:A:3395:LEU:HG	1.99	0.45
1:A:3669:TRP:NE1	1:A:3673:GLN:OE1	2.50	0.45
1:A:4028:PHE:CE2	1:A:4090:LYS:HB2	2.51	0.45
1:A:514:GLN:HE22	1:A:589:ARG:HG2	1.82	0.45
1:A:969:GLU:O	1:A:973:ILE:HG23	2.16	0.45
1:A:988:GLU:OE1	1:A:988:GLU:N	2.50	0.45
1:A:1010:TRP:CD1	1:A:1011:PRO:HD2	2.52	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1212:PHE:HZ	1:A:1252:LEU:HG	1.80	0.45
1:A:1317:SER:O	1:A:1320:LYS:HG2	2.17	0.45
1:A:2119:GLU:HB3	1:A:2125:PHE:CD1	2.51	0.45
1:A:2264:HIS:HB3	1:A:2266:TYR:CZ	2.52	0.45
1:A:2458:CYS:HA	1:A:2461:GLU:OE2	2.16	0.45
1:A:2704:ALA:HB1	1:A:2874:SER:HA	1.98	0.45
1:A:2783:PHE:HA	1:A:2786:CYS:SG	2.57	0.45
1:A:3711:GLN:HA	1:A:3714:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:3742:ARG:NH2	1:A:3746:GLU:OE2	2.50	0.45
1:A:3878:LEU:O	1:A:3881:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:1880:ARG:O	1:A:5141:ARG:NH2	2.50	0.44
1:A:1956:ALA:HB1	2:A:5201:ATP:O1G	2.16	0.44
1:A:2331:ARG:NH2	1:A:2352:GLU:HA	2.32	0.44
1:A:2487:PRO:HG2	1:A:2527:TYR:HE1	1.81	0.44
1:A:4048:VAL:HG12	1:A:4063:HIS:H	1.82	0.44
1:A:4356:LEU:HB2	1:A:4361:ILE:HG21	1.98	0.44
1:A:1494:LEU:HB3	1:A:1498:SER:OG	2.17	0.44
1:A:1528:LEU:HD12	1:A:1529:LEU:N	2.32	0.44
1:A:1669:GLU:O	1:A:1672:VAL:HG22	2.16	0.44
1:A:3409:ILE:HB	1:A:3410:MET:SD	2.57	0.44
1:A:3559:ALA:HA	1:A:3562:GLU:CD	2.42	0.44
1:A:3816:CYS:SG	1:A:3843:LEU:HD11	2.57	0.44
1:A:4548:LEU:O	1:A:4552:ILE:HD12	2.17	0.44
1:A:518:ASP:OD1	1:A:518:ASP:N	2.50	0.44
1:A:2156:GLU:O	1:A:2160:GLN:HG2	2.17	0.44
1:A:2504:LEU:HD22	1:A:2910:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:2534:PRO:O	1:A:2535:SER:OG	2.25	0.44
1:A:2700:ARG:HE	1:A:2700:ARG:HB2	1.56	0.44
1:A:2874:SER:O	1:A:2878:ILE:HG22	2.17	0.44
1:A:3002:LEU:HD22	1:A:3004:VAL:HG13	1.98	0.44
1:A:3115:VAL:HG12	1:A:3119:GLN:HE22	1.82	0.44
1:A:3834:GLN:HA	1:A:3837:LYS:HG2	1.97	0.44
1:A:4430:PRO:HB2	1:A:4788:THR:HG21	1.98	0.44
1:A:4951:ILE:HA	1:A:4954:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:5023:GLN:HG3	1:A:5074:LEU:HD11	2.00	0.44
1:A:5040:LEU:H	1:A:5040:LEU:HD23	1.81	0.44
1:A:1661:PHE:O	1:A:1664:ASN:HB2	2.17	0.44
1:A:1971:LEU:HD22	1:A:2015:ILE:HD11	1.99	0.44
1:A:2199:ALA:HB1	1:A:2206:ARG:HH12	1.82	0.44
1:A:2283:LEU:HD12	1:A:2322:PHE:HD2	1.83	0.44
1:A:3503:MET:O	1:A:3507:THR:OG1	2.28	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:802:GLN:HG3	1:A:804:ARG:HB3	1.99	0.44
1:A:1723:MET:HE2	1:A:1723:MET:N	2.31	0.44
1:A:2042:MET:HA	1:A:2048:ILE:HD13	1.99	0.44
1:A:2836:PRO:O	1:A:2838:LYS:HG2	2.17	0.44
1:A:2878:ILE:HG21	1:A:2921:ILE:HG21	1.99	0.44
1:A:3778:PHE:O	1:A:3781:ILE:HG22	2.18	0.44
1:A:4804:ASP:OD1	1:A:4804:ASP:N	2.48	0.44
1:A:688:PRO:HA	1:A:770:TYR:CE1	2.53	0.44
1:A:789:ASN:O	1:A:792:LYS:HG2	2.18	0.44
1:A:1070:ALA:HB1	1:A:1097:TRP:CZ3	2.52	0.44
1:A:1364:ILE:O	1:A:1368:GLN:HG2	2.18	0.44
1:A:1924:TYR:HE2	1:A:1928:HIS:CE1	2.35	0.44
1:A:2002:LEU:HD22	1:A:2047:LYS:HD2	2.00	0.44
1:A:2020:ILE:HG21	1:A:2061:ILE:HD12	2.00	0.44
1:A:2316:ARG:HA	1:A:2316:ARG:NE	2.33	0.44
1:A:2494:GLU:HB3	1:A:2592:ASN:HD21	1.82	0.44
1:A:2562:LEU:O	1:A:2610:ARG:NE	2.51	0.44
1:A:3509:LEU:HD13	1:A:3512:LEU:HD11	1.99	0.44
1:A:3772:ARG:HG3	1:A:3773:THR:H	1.81	0.44
1:A:3841:THR:HG23	1:A:3842:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:3905:LEU:O	1:A:3909:LEU:HB2	2.17	0.44
1:A:4378:ILE:HG13	1:A:4564:GLN:OE1	2.18	0.44
1:A:507:ASP:HA	1:A:510:PHE:CD2	2.52	0.44
1:A:566:VAL:O	1:A:570:MET:HG2	2.17	0.44
1:A:1951:VAL:HG13	1:A:2091:VAL:HG13	2.00	0.44
1:A:2364:ILE:HG23	1:A:2365:LEU:HD22	1.99	0.44
1:A:2371:PHE:HB3	1:A:2377:VAL:HG21	1.98	0.44
1:A:3340:PHE:CE1	1:A:3347:ALA:HA	2.53	0.44
1:A:4391:GLU:CD	1:A:4590:HIS:HE2	2.26	0.44
1:A:4399:ILE:HD12	1:A:4597:LEU:HB2	1.98	0.44
1:A:4421:MET:HE2	1:A:4421:MET:N	2.33	0.44
1:A:451:CYS:HB2	1:A:541:HIS:HB2	1.99	0.44
1:A:701:SER:HA	1:A:704:ARG:HG2	2.00	0.44
1:A:875:GLN:O	1:A:878:LEU:HD12	2.17	0.44
1:A:980:CYS:SG	1:A:1005:VAL:HG23	2.57	0.44
1:A:1567:ASN:OD1	1:A:1568:THR:N	2.50	0.44
1:A:2387:LYS:HG2	1:A:2543:PHE:CD2	2.53	0.44
1:A:2548:ASP:HA	1:A:2551:GLU:CB	2.48	0.44
1:A:2850:LEU:HD12	1:A:2851:ASP:H	1.83	0.44
1:A:4065:LYS:NZ	1:A:4073:VAL:O	2.43	0.44
1:A:4776:LEU:HD21	1:A:4804:ASP:HA	2.00	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:889:PHE:CZ	1:A:908:GLU:HG3	2.53	0.44
1:A:1656:LYS:HG2	1:A:1761:LEU:CB	2.48	0.44
1:A:1824:VAL:HG11	1:A:2038:LEU:HD11	1.98	0.44
1:A:1949:GLY:O	1:A:2058:LEU:HA	2.17	0.44
1:A:2466:ARG:NH1	1:A:2473:LEU:O	2.51	0.44
1:A:2495:MET:HB3	1:A:2592:ASN:CG	2.42	0.44
1:A:2582:ALA:O	1:A:2585:MET:HG2	2.18	0.44
1:A:3002:LEU:HD23	1:A:3003:LEU:N	2.33	0.44
1:A:3085:GLN:HB3	1:A:3087:TYR:HE1	1.83	0.44
1:A:3187:SER:O	1:A:3191:GLN:HG3	2.18	0.44
1:A:3529:MET:N	1:A:3529:MET:SD	2.90	0.44
1:A:3568:HIS:HE2	1:A:4966:GLU:CD	2.26	0.44
1:A:3611:TRP:CD1	1:A:3656:PRO:HB3	2.52	0.44
1:A:4656:PRO:HA	1:A:4659:LYS:HE3	2.00	0.44
1:A:4735:ARG:NH1	1:A:4920:PRO:HG3	2.33	0.44
1:A:465:HIS:N	1:A:530:GLN:OE1	2.47	0.43
1:A:681:LYS:NZ	1:A:4748:GLU:HG2	2.33	0.43
1:A:776:ARG:HD2	1:A:777:LYS:N	2.33	0.43
1:A:2096:PRO:HA	1:A:2099:VAL:HG12	1.98	0.43
1:A:2599:LEU:HA	1:A:2602:VAL:HG22	2.00	0.43
1:A:2611:TRP:HZ2	1:A:2760:LEU:HD11	1.83	0.43
1:A:2776:PRO:HD3	1:A:2817:PRO:HA	2.00	0.43
1:A:3592:ASP:OD1	1:A:3592:ASP:N	2.50	0.43
1:A:3665:LEU:HD23	1:A:3668:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:4022:LEU:O	1:A:4026:MET:N	2.49	0.43
1:A:613:ASP:OD1	1:A:616:SER:OG	2.32	0.43
1:A:1207:HIS:NE2	1:A:1272:ASP:OD2	2.51	0.43
1:A:1325:VAL:O	1:A:1329:LEU:HB2	2.16	0.43
1:A:2218:LEU:HD21	1:A:2303:LYS:HE2	2.00	0.43
1:A:3494:ASP:HB2	1:A:3498:SER:OG	2.19	0.43
1:A:3502:ASN:HB3	1:A:4977:PHE:CD1	2.53	0.43
1:A:648:TYR:HA	1:A:651:ASN:HD21	1.83	0.43
1:A:795:MET:HB2	1:A:847:LYS:HZ2	1.84	0.43
1:A:1238:LEU:O	1:A:1243:ASN:N	2.50	0.43
1:A:2081:LEU:HD23	1:A:2085:LEU:HD21	1.99	0.43
1:A:2137:GLN:HG2	1:A:2139:GLN:OE1	2.19	0.43
1:A:2866:PRO:HG3	1:A:2914:LEU:HD21	1.99	0.43
1:A:2940:ILE:O	1:A:2944:VAL:HG12	2.18	0.43
1:A:3716:ASP:OD1	1:A:3717:PHE:N	2.51	0.43
1:A:3763:TRP:HA	1:A:3766:LEU:HD12	2.00	0.43
1:A:4020:VAL:HA	1:A:4023:VAL:HG12	2.00	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:4086:LYS:NZ	1:A:4880:CYS:O	2.38	0.43
1:A:4708:VAL:HB	1:A:4896:LEU:HD12	1.99	0.43
1:A:849:LEU:O	1:A:866:TYR:OH	2.36	0.43
1:A:998:PHE:CD1	1:A:1001:LEU:HD11	2.53	0.43
1:A:1311:THR:HA	1:A:1314:GLN:HG3	2.00	0.43
1:A:1941:VAL:HG12	1:A:1970:LYS:HD2	2.00	0.43
1:A:2002:LEU:O	1:A:2006:LYS:HG2	2.18	0.43
1:A:2476:ASP:OD1	1:A:2476:ASP:N	2.41	0.43
1:A:4576:LYS:HA	1:A:4576:LYS:HD3	1.85	0.43
1:A:692:TRP:O	1:A:732:ARG:HD3	2.18	0.43
1:A:2648:MET:HE1	1:A:2686:VAL:HA	2.00	0.43
1:A:2898:LYS:O	1:A:2902:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:4246:LYS:HD3	1:A:4249:HIS:HB2	2.00	0.43
1:A:2199:ALA:HB2	1:A:2205:LEU:HD23	1.99	0.43
1:A:4539:VAL:O	1:A:4542:THR:OG1	2.37	0.43
1:A:394:LEU:HD13	1:A:397:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:626:GLY:HA2	1:A:631:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:734:TRP:HA	1:A:737:VAL:HG12	2.01	0.43
1:A:1822:ASP:OD1	1:A:1822:ASP:N	2.50	0.43
1:A:2648:MET:SD	1:A:2689:VAL:HG21	2.58	0.43
1:A:2674:LYS:HA	1:A:2677:ASN:OD1	2.19	0.43
1:A:3066:ASN:OD1	1:A:3066:ASN:N	2.52	0.43
1:A:3149:GLU:O	1:A:3152:GLN:HG3	2.19	0.43
1:A:3173:PRO:HA	1:A:3176:VAL:HG12	2.00	0.43
1:A:3368:LYS:HD2	1:A:3368:LYS:HA	1.76	0.43
1:A:3847:CYS:HB2	1:A:3867:ARG:HG3	2.00	0.43
1:A:3865:GLU:O	1:A:3869:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:4375:LEU:HD23	1:A:4542:THR:HG21	2.00	0.43
1:A:5040:LEU:HG	1:A:5041:PHE:CD2	2.53	0.43
1:A:560:THR:O	1:A:564:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:720:LYS:HB3	1:A:723:LEU:HD13	1.99	0.43
1:A:1007:THR:HG23	1:A:1008:LYS:HG2	2.00	0.43
1:A:1590:LEU:HD13	1:A:1598:PHE:CE2	2.53	0.43
1:A:2128:PRO:HG3	1:A:2184:ASN:HB2	2.00	0.43
1:A:2804:LEU:HB2	1:A:2807:VAL:HB	2.01	0.43
1:A:2979:ILE:HG23	1:A:3002:LEU:HD11	1.99	0.43
1:A:3955:GLN:O	1:A:3955:GLN:NE2	2.52	0.43
1:A:4534:HIS:O	1:A:4563:LEU:HD21	2.19	0.43
1:A:872:SER:O	1:A:876:GLU:HG2	2.18	0.43
1:A:1770:HIS:O	1:A:1773:THR:OG1	2.26	0.43
1:A:2208:PHE:HB2	1:A:2311:LEU:HD13	2.01	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2819:LYS:HD3	1:A:2819:LYS:HA	1.73	0.43
1:A:2882:ASP:OD1	1:A:2885:VAL:HG22	2.19	0.43
1:A:3279:THR:HA	1:A:3401:ILE:O	2.19	0.43
1:A:3710:LEU:HD11	1:A:3759:LEU:C	2.44	0.43
1:A:3976:ILE:HG13	1:A:3977:PRO:CD	2.46	0.43
1:A:4530:ARG:HD2	1:A:4531:LEU:N	2.33	0.43
1:A:4580:ARG:HB3	1:A:4584:GLU:HB2	2.00	0.43
1:A:795:MET:HB2	1:A:847:LYS:NZ	2.34	0.43
1:A:835:PHE:CE1	1:A:911:VAL:HA	2.54	0.43
1:A:1508:VAL:HB	1:A:1529:LEU:HB2	2.01	0.43
1:A:1645:PHE:CG	1:A:1744:MET:HE2	2.53	0.43
1:A:1717:TYR:HD1	1:A:1720:ARG:HH21	1.66	0.43
1:A:1764:LEU:HD23	1:A:1764:LEU:HA	1.86	0.43
1:A:2489:ARG:NH1	1:A:2596:PHE:HE1	2.16	0.43
1:A:2952:ASP:OD1	1:A:2952:ASP:N	2.50	0.43
1:A:3230:SER:O	1:A:3236:SER:OG	2.36	0.43
1:A:3481:VAL:HA	1:A:3484:CYS:SG	2.59	0.43
1:A:3940:SER:HB2	1:A:4004:ALA:HB1	2.00	0.43
1:A:4575:THR:HA	1:A:4585:THR:HG21	2.00	0.43
1:A:5064:LEU:O	1:A:5141:ARG:NH1	2.52	0.43
1:A:354:ALA:HA	1:A:468:ASP:O	2.19	0.42
1:A:370:TYR:CD2	1:A:384:ASP:HB3	2.54	0.42
1:A:532:TYR:CZ	1:A:536:ARG:HD3	2.54	0.42
1:A:973:ILE:HG22	1:A:1004:ALA:HB2	1.99	0.42
1:A:1667:THR:HG21	1:A:2044:ILE:O	2.19	0.42
1:A:2274:MET:HE3	1:A:2274:MET:HB3	1.87	0.42
1:A:3884:LEU:HA	1:A:3887:THR:HG22	2.00	0.42
1:A:4752:ILE:O	1:A:4756:ILE:HG22	2.19	0.42
1:A:4830:LEU:O	1:A:4833:LEU:HG	2.18	0.42
1:A:2019:ASP:OD1	1:A:2020:ILE:N	2.49	0.42
1:A:2417:THR:O	1:A:2421:ILE:HD12	2.19	0.42
1:A:2715:MET:HE3	1:A:2715:MET:HA	2.00	0.42
1:A:3053:MET:HG2	1:A:3105:PHE:CZ	2.54	0.42
1:A:4530:ARG:HH11	1:A:4531:LEU:HB2	1.83	0.42
1:A:4841:VAL:HG21	1:A:4908:LEU:HD12	2.01	0.42
1:A:5069:LEU:HD12	1:A:5072:PHE:HD2	1.84	0.42
1:A:784:LYS:HE2	1:A:784:LYS:HA	2.01	0.42
1:A:818:CYS:SG	1:A:848:LEU:HD21	2.60	0.42
1:A:1520:ILE:HG12	1:A:1591:HIS:ND1	2.33	0.42
1:A:1710:CYS:O	1:A:1766:ARG:NE	2.53	0.42
1:A:1794:LEU:HD22	1:A:1905:PHE:HB3	2.01	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2806:GLN:HB3	1:A:2809:LEU:HD23	2.00	0.42
1:A:3075:LEU:HD22	1:A:3128:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:3713:TYR:HD2	1:A:3764:VAL:HG21	1.85	0.42
1:A:4599:VAL:HG21	1:A:4630:ARG:HH22	1.85	0.42
1:A:4883:GLN:HB2	1:A:4891:SER:OG	2.20	0.42
1:A:1383:GLU:HA	1:A:1386:ARG:NE	2.34	0.42
1:A:1393:TRP:NE1	1:A:1483:LYS:HG2	2.35	0.42
1:A:2342:LEU:HD22	1:A:2368:GLU:HG3	2.02	0.42
1:A:2386:GLY:HA2	1:A:2389:ARG:NH2	2.29	0.42
1:A:4273:TYR:HB3	1:A:4319:LEU:HD21	2.01	0.42
1:A:4308:SER:HB2	1:A:4312:GLN:CD	2.45	0.42
1:A:4626:THR:O	1:A:4629:LEU:HG	2.20	0.42
1:A:717:MET:HE3	1:A:717:MET:HB3	1.89	0.42
1:A:797:LEU:HA	1:A:800:ILE:HD11	2.01	0.42
1:A:835:PHE:CD2	1:A:911:VAL:HG22	2.54	0.42
1:A:1018:VAL:HG23	1:A:1019:PHE:H	1.84	0.42
1:A:1706:ALA:HA	1:A:1770:HIS:ND1	2.34	0.42
1:A:2137:GLN:CD	1:A:2137:GLN:H	2.28	0.42
1:A:2379:ILE:HD13	1:A:2379:ILE:HA	1.90	0.42
1:A:3582:LEU:O	1:A:3586:ILE:HG12	2.19	0.42
1:A:3847:CYS:HB2	1:A:3867:ARG:HG2	2.00	0.42
1:A:3891:ILE:HG21	1:A:4007:LYS:HG2	2.01	0.42
1:A:4232:LEU:HD22	1:A:4240:PHE:HE2	1.84	0.42
1:A:4521:GLN:HE22	1:A:4625:GLU:HB2	1.84	0.42
1:A:4895:ASP:HB3	1:A:4898:LYS:HE3	2.01	0.42
1:A:642:ARG:HE	1:A:642:ARG:HB3	1.58	0.42
1:A:943:PRO:O	1:A:946:GLN:HG3	2.19	0.42
1:A:2182:PHE:CE1	1:A:2223:PHE:HD2	2.37	0.42
1:A:2681:ALA:HA	1:A:2684:ASP:OD2	2.18	0.42
1:A:3004:VAL:CG2	1:A:3110:ILE:HG12	2.50	0.42
1:A:3015:LEU:HA	1:A:3019:PHE:HD1	1.85	0.42
1:A:4104:LEU:HD13	1:A:4124:PHE:CE2	2.54	0.42
1:A:4896:LEU:HD23	1:A:4896:LEU:H	1.84	0.42
1:A:5016:ARG:HG3	1:A:5017:HIS:CD2	2.54	0.42
1:A:1097:TRP:CE3	1:A:1097:TRP:HA	2.55	0.42
1:A:1393:TRP:HE1	1:A:1483:LYS:HG2	1.84	0.42
1:A:1783:LEU:HG	1:A:1887:GLN:OE1	2.20	0.42
1:A:2394:LEU:HD12	1:A:2394:LEU:O	2.19	0.42
1:A:2534:PRO:C	1:A:2536:LEU:H	2.28	0.42
1:A:2556:GLN:HA	1:A:2559:VAL:HG12	2.00	0.42
1:A:2622:GLU:HG3	1:A:2756:LEU:HD21	2.01	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:3391:PHE:N	1:A:3391:PHE:CD1	2.87	0.42
1:A:3423:SER:OG	1:A:3532:HIS:HE1	2.02	0.42
1:A:3560:LEU:HD23	1:A:3560:LEU:HA	1.89	0.42
1:A:4272:ARG:HD3	1:A:4646:ILE:HD13	2.02	0.42
1:A:4535:LEU:O	1:A:4539:VAL:HG23	2.19	0.42
1:A:707:ALA:HA	1:A:708:PRO:HD3	1.89	0.42
1:A:716:PHE:C	1:A:716:PHE:CD2	2.97	0.42
1:A:932:GLY:O	1:A:935:GLU:HG3	2.19	0.42
1:A:1070:ALA:O	1:A:1073:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:1093:PHE:HA	1:A:1096:ILE:HG22	2.02	0.42
1:A:1360:SER:HB2	1:A:1361:PRO:HD3	2.01	0.42
1:A:1725:LYS:O	1:A:1729:GLN:HG3	2.19	0.42
1:A:1901:ILE:HA	1:A:1904:THR:HG22	1.99	0.42
1:A:1943:ARG:HG3	1:A:1946:LEU:CD1	2.48	0.42
1:A:2115:MET:HE3	1:A:2115:MET:HB3	1.88	0.42
1:A:2368:GLU:OE1	1:A:2372:ARG:HD3	2.19	0.42
1:A:3481:VAL:O	1:A:3485:VAL:HG13	2.19	0.42
1:A:3761:LEU:N	1:A:3762:PRO:HD2	2.35	0.42
1:A:4067:LEU:HD11	1:A:4084:LEU:HD21	2.02	0.42
1:A:4086:LYS:O	1:A:4090:LYS:HG2	2.20	0.42
1:A:4307:ARG:HG2	1:A:4308:SER:N	2.35	0.42
1:A:1755:LEU:C	1:A:1757:HIS:H	2.27	0.42
1:A:1832:THR:OG1	1:A:1835:GLU:HG3	2.20	0.42
1:A:1964:VAL:HG22	1:A:2058:LEU:HD13	2.02	0.42
1:A:2535:SER:OG	2:A:5201:ATP:O3G	2.37	0.42
1:A:3035:GLN:NE2	1:A:3312:ASP:HB2	2.32	0.42
1:A:3835:LEU:O	1:A:3839:LEU:HG	2.19	0.42
1:A:3852:LEU:HD22	1:A:3863:ILE:HG21	2.00	0.42
1:A:5026:SER:OG	1:A:5077:HIS:NE2	2.40	0.42
1:A:658:ASP:C	1:A:660:ARG:H	2.28	0.42
1:A:1025:PHE:HZ	1:A:1086:ILE:HG22	1.84	0.42
1:A:1934:ARG:HA	1:A:1934:ARG:NE	2.35	0.42
1:A:2643:LEU:HD12	1:A:2643:LEU:HA	1.86	0.42
1:A:823:GLU:HA	1:A:880:THR:HG21	2.02	0.41
1:A:892:ARG:HH21	1:A:894:LEU:HD12	1.85	0.41
1:A:1199:LYS:O	1:A:1202:SER:OG	2.24	0.41
1:A:1666:TYR:HB2	1:A:1671:LEU:HD12	2.01	0.41
1:A:2123:GLU:HB3	1:A:2127:ARG:HD2	2.02	0.41
1:A:2368:GLU:HA	1:A:2371:PHE:CE2	2.55	0.41
1:A:2387:LYS:O	1:A:2391:ILE:HG12	2.19	0.41
1:A:2438:GLN:HE22	1:A:2439:HIS:CE1	2.38	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2443:THR:OG1	1:A:2444:ILE:N	2.53	0.41
1:A:2968:ARG:HD2	1:A:2968:ARG:HA	1.73	0.41
1:A:3255:PHE:CZ	1:A:3259:LEU:HD11	2.55	0.41
1:A:3256:VAL:O	1:A:3260:GLN:NE2	2.53	0.41
1:A:4988:ASP:HA	1:A:5014:GLN:HG3	2.03	0.41
1:A:1204:LYS:O	1:A:1210:GLN:NE2	2.53	0.41
1:A:1457:GLU:O	1:A:1460:ARG:HG2	2.20	0.41
1:A:2014:VAL:HB	1:A:2016:PHE:CE1	2.55	0.41
1:A:2125:PHE:HE2	1:A:2180:ALA:HB3	1.86	0.41
1:A:2384:GLY:HA2	1:A:2598:SER:O	2.20	0.41
1:A:3869:LEU:HD22	1:A:3872:ARG:NH1	2.35	0.41
1:A:3941:ARG:NH1	1:A:3963:ASP:OD2	2.53	0.41
1:A:548:TRP:CD1	1:A:550:SER:HG	2.37	0.41
1:A:829:THR:CG2	1:A:834:PHE:HB2	2.50	0.41
1:A:1291:ASN:HB2	1:A:1293:GLN:HG3	2.01	0.41
1:A:1624:GLN:C	1:A:1625:LEU:HD23	2.45	0.41
1:A:1630:ASP:HB3	1:A:1633:GLN:HE22	1.85	0.41
1:A:1740:LEU:HA	1:A:1743:ILE:HG22	2.02	0.41
1:A:1823:GLU:HB2	1:A:1854:TYR:CG	2.56	0.41
1:A:3476:ASP:HB3	1:A:3479:ARG:HB3	2.02	0.41
1:A:4018:PHE:HA	1:A:4021:ASP:HB2	2.02	0.41
1:A:4126:SER:O	1:A:4129:GLU:HG2	2.20	0.41
1:A:4259:VAL:HG23	1:A:4656:PRO:HB2	2.01	0.41
1:A:4538:LEU:HD12	1:A:4538:LEU:HA	1.90	0.41
1:A:806:PHE:HZ	1:A:848:LEU:HB2	1.85	0.41
1:A:1588:ILE:HD12	1:A:1588:ILE:HA	1.88	0.41
1:A:1933:LYS:NZ	1:A:1934:ARG:HH12	2.18	0.41
1:A:3116:VAL:HA	1:A:3120:PHE:HB2	2.02	0.41
1:A:4275:VAL:HG21	1:A:4591:LEU:HA	2.03	0.41
1:A:4636:ASP:OD1	1:A:4636:ASP:N	2.53	0.41
1:A:5099:LEU:HB2	1:A:5126:ILE:HG21	2.02	0.41
1:A:1031:TRP:CD1	1:A:1033:ASP:HB2	2.55	0.41
1:A:1056:ARG:HA	1:A:1059:MET:HG2	2.03	0.41
1:A:1192:ASP:OD1	1:A:1193:ILE:N	2.53	0.41
1:A:2257:LYS:HB2	1:A:2257:LYS:HE2	1.87	0.41
1:A:2376:PRO:HB2	1:A:2539:LEU:HD13	2.02	0.41
1:A:2616:SER:O	1:A:2620:LEU:HD23	2.19	0.41
1:A:3416:LYS:HD3	1:A:3474:PHE:CZ	2.55	0.41
1:A:3489:VAL:HG11	1:A:3505:ARG:HB3	2.02	0.41
1:A:3967:CYS:HB2	1:A:3970:CYS:SG	2.60	0.41
1:A:934:MET:HE2	1:A:934:MET:HB2	1.88	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:937:ARG:HA	1:A:3237:PHE:HD2	1.85	0.41
1:A:1659:GLU:OE1	1:A:1660:HIS:NE2	2.54	0.41
1:A:1822:ASP:O	1:A:1823:GLU:HG2	2.20	0.41
1:A:2599:LEU:HD13	1:A:2602:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:2801:VAL:HA	1:A:2840:VAL:HG13	2.03	0.41
1:A:3664:TYR:O	1:A:3667:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:3809:ASP:OD1	1:A:3809:ASP:N	2.51	0.41
1:A:4534:HIS:HB3	1:A:4563:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:4696:GLN:HG3	1:A:4715:LEU:HD13	2.03	0.41
1:A:1080:VAL:O	1:A:1084:GLU:HG2	2.20	0.41
1:A:1294:ASP:OD1	1:A:1294:ASP:N	2.51	0.41
1:A:1736:LEU:HD23	1:A:1740:LEU:HB2	2.03	0.41
1:A:2094:ARG:HB3	1:A:2098:GLU:HB2	2.02	0.41
1:A:2128:PRO:HB3	1:A:2183:LEU:HD23	2.03	0.41
1:A:2388:THR:HA	1:A:2391:ILE:HD11	2.03	0.41
1:A:2416:THR:HG22	1:A:2421:ILE:HD11	2.03	0.41
1:A:2557:GLN:HE22	1:A:2561:ARG:HH11	1.69	0.41
1:A:2690:GLN:HG2	1:A:2714:PHE:CG	2.55	0.41
1:A:3135:MET:O	1:A:3139:LEU:HD23	2.21	0.41
1:A:4281:LYS:HA	1:A:4284:ARG:HG2	2.01	0.41
1:A:1026:LYS:HE3	1:A:1085:LEU:HD11	2.03	0.41
1:A:1349:GLU:HB3	1:A:1351:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:1494:LEU:HB3	1:A:1498:SER:HG	1.85	0.41
1:A:1926:GLN:HE21	1:A:1926:GLN:HB3	1.72	0.41
1:A:2020:ILE:HD11	1:A:2024:VAL:HG21	2.02	0.41
1:A:2206:ARG:HA	1:A:2206:ARG:HD3	1.92	0.41
1:A:2840:VAL:HG12	1:A:2841:GLY:O	2.20	0.41
1:A:3114:ASP:OD1	1:A:3115:VAL:N	2.53	0.41
1:A:3226:VAL:HG11	1:A:3246:TYR:CD2	2.56	0.41
1:A:3279:THR:HG22	1:A:3401:ILE:O	2.21	0.41
1:A:4147:LEU:HD23	1:A:4147:LEU:HA	1.94	0.41
1:A:4337:HIS:N	1:A:4338:PRO:HD2	2.35	0.41
1:A:4391:GLU:OE1	1:A:4590:HIS:NE2	2.47	0.41
1:A:5019:ILE:HG13	1:A:5020:ALA:H	1.85	0.41
1:A:659:GLU:HG2	1:A:659:GLU:O	2.21	0.41
1:A:998:PHE:O	1:A:1002:LEU:HG	2.21	0.41
1:A:1118:LYS:HA	1:A:1121:ARG:HG2	2.03	0.41
1:A:1390:LEU:HD22	1:A:1476:ALA:HB2	2.02	0.41
1:A:1596:MET:HA	1:A:1599:ARG:HG2	2.01	0.41
1:A:1680:LYS:HA	1:A:1680:LYS:HD3	1.88	0.41
1:A:1684:SER:O	1:A:1688:LEU:HD23	2.21	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1848:SER:O	1:A:1852:LYS:NZ	2.54	0.41
1:A:1901:ILE:N	1:A:1902:PRO:HD2	2.36	0.41
1:A:1968:HIS:CE1	1:A:1982:LEU:HB2	2.56	0.41
1:A:1981:PRO:HD2	1:A:2014:VAL:HG13	2.03	0.41
1:A:2014:VAL:HB	1:A:2016:PHE:HE1	1.86	0.41
1:A:2203:ASP:HA	1:A:2206:ARG:NH2	2.35	0.41
1:A:2378:ILE:HD11	1:A:2485:CYS:SG	2.61	0.41
1:A:2740:LYS:HD2	1:A:2803:VAL:HG11	2.03	0.41
1:A:2762:GLN:N	1:A:2797:GLN:O	2.35	0.41
1:A:3202:THR:C	1:A:3204:GLU:H	2.28	0.41
1:A:3268:HIS:ND1	1:A:3268:HIS:C	2.79	0.41
1:A:3689:PHE:CZ	1:A:3761:LEU:HB2	2.55	0.41
1:A:3951:HIS:HB2	1:A:4074:VAL:HG11	2.03	0.41
1:A:4732:ALA:HA	1:A:4735:ARG:HG3	2.03	0.41
1:A:5076:LEU:HD22	1:A:5080:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:360:PHE:CD1	1:A:422:ILE:HD12	2.56	0.41
1:A:388:MET:HE1	1:A:403:GLY:N	2.36	0.41
1:A:689:GLU:HG2	1:A:770:TYR:CG	2.56	0.41
1:A:884:TRP:NE1	1:A:888:LEU:HD13	2.36	0.41
1:A:2640:ASP:HB2	1:A:2643:LEU:H	1.86	0.41
1:A:2771:SER:O	1:A:2774:SER:OG	2.38	0.41
1:A:3003:LEU:HB2	1:A:3128:LEU:HB3	2.03	0.41
1:A:3280:PHE:HE2	1:A:3400:HIS:HE2	1.61	0.41
1:A:3824:LEU:HA	1:A:3832:TRP:CZ2	2.56	0.41
1:A:4427:PRO:HA	1:A:4617:ARG:NE	2.35	0.41
1:A:5033:ARG:HE	1:A:5040:LEU:HA	1.86	0.41
1:A:5094:ASN:OD1	1:A:5096:ASN:ND2	2.54	0.41
1:A:1083:LEU:O	1:A:1086:ILE:HG12	2.21	0.40
1:A:1137:LEU:HA	1:A:1137:LEU:HD23	1.76	0.40
1:A:1509:TYR:CD1	1:A:1580:MET:HG2	2.57	0.40
1:A:1674:LEU:CD2	1:A:1690:MET:HE3	2.50	0.40
1:A:1880:ARG:HG2	1:A:1880:ARG:H	1.65	0.40
1:A:2096:PRO:O	1:A:2100:ILE:HG23	2.21	0.40
1:A:2338:LEU:HD11	1:A:2356:LEU:HD21	2.02	0.40
1:A:2983:ILE:HD13	1:A:2983:ILE:HA	1.87	0.40
1:A:3158:ALA:HB1	1:A:3171:TYR:HB3	2.03	0.40
1:A:3597:LEU:HD11	1:A:3653:ASN:O	2.21	0.40
1:A:3682:SER:HA	1:A:3766:LEU:HD21	2.01	0.40
1:A:3933:ASP:O	1:A:3937:LYS:HD3	2.21	0.40
1:A:4419:VAL:HG13	1:A:4544:ASN:HD21	1.86	0.40
1:A:758:PRO:HG3	1:A:802:GLN:HE21	1.85	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1481:TRP:HA	1:A:1484:THR:HG22	2.03	0.40
1:A:1597:LEU:HD13	1:A:1751:MET:HE1	2.04	0.40
1:A:1657:ARG:HG2	1:A:1663:LEU:HD23	2.03	0.40
1:A:1685:GLU:HG2	1:A:2008:LYS:HB2	2.03	0.40
1:A:2345:GLU:HB2	1:A:2346:TRP:CE3	2.55	0.40
1:A:4134:GLN:HG3	1:A:4877:LEU:HD22	2.04	0.40
1:A:4729:GLU:HG2	1:A:4771:ARG:HD3	2.03	0.40
1:A:1087:LEU:O	1:A:1090:GLN:HG3	2.21	0.40
1:A:1373:ILE:HG13	1:A:1459:TRP:CZ2	2.56	0.40
1:A:2309:LYS:HA	1:A:2309:LYS:HD2	1.73	0.40
1:A:2703:ILE:HD13	1:A:2703:ILE:HA	1.93	0.40
1:A:3192:ALA:O	1:A:3196:GLN:HG2	2.21	0.40
1:A:3797:GLU:OE1	1:A:3797:GLU:N	2.55	0.40
1:A:4368:LEU:HD13	1:A:4373:LEU:HD13	2.03	0.40
1:A:4386:LYS:O	1:A:4390:THR:OG1	2.33	0.40
1:A:4426:LEU:HD22	1:A:4429:MET:HE2	2.03	0.40
1:A:1318:SER:HA	1:A:1321:VAL:HG12	2.03	0.40
1:A:1326:ARG:HH22	1:A:1333:GLY:C	2.29	0.40
1:A:1537:PRO:HB2	1:A:1538:GLU:H	1.78	0.40
1:A:1769:ALA:O	1:A:1773:THR:HG23	2.22	0.40
1:A:2341:ALA:HB1	1:A:2365:LEU:HD11	2.04	0.40
1:A:3562:GLU:HA	1:A:4961:TYR:CE2	2.57	0.40
1:A:3954:ALA:HA	1:A:3967:CYS:SG	2.61	0.40
1:A:4521:GLN:NE2	1:A:4625:GLU:HB2	2.37	0.40
1:A:1691:LEU:HD23	1:A:1691:LEU:HA	1.82	0.40
1:A:1744:MET:O	1:A:1747:SER:OG	2.24	0.40
1:A:1823:GLU:HG2	1:A:1824:VAL:HG23	2.04	0.40
1:A:1833:ILE:O	1:A:1836:VAL:HG22	2.21	0.40
1:A:2704:ALA:HB3	2:A:5205:ATP:HN62	1.87	0.40
1:A:2735:SER:N	2:A:5205:ATP:O2B	2.55	0.40
1:A:3293:ALA:HA	1:A:3296:LEU:HB2	2.03	0.40
1:A:3294:SER:O	1:A:3297:ARG:HG3	2.22	0.40
1:A:3325:LEU:HD13	1:A:3325:LEU:HA	1.94	0.40
1:A:3536:ASN:O	1:A:3540:GLU:HG2	2.22	0.40
1:A:3642:GLN:NE2	1:A:4742:GLN:HG2	2.36	0.40
1:A:3704:ALA:O	1:A:3707:GLN:HG3	2.21	0.40
1:A:4530:ARG:NH1	1:A:4531:LEU:HB2	2.37	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	4552/5161 (88%)	4198 (92%)	353 (8%)	1 (0%)	100	100

All (1) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	4166	PRO

5.3.2 Protein sidechains

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	4111/4604 (89%)	4044 (98%)	67 (2%)	58	74

All (67) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	675	MET
1	A	775	LEU
1	A	846	CYS
1	A	894	LEU
1	A	986	VAL
1	A	1018	VAL
1	A	1087	LEU
1	A	1203	LEU
1	A	1233	SER
1	A	1261	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1311	THR
1	A	1363	PHE
1	A	1505	SER
1	A	1546	GLU
1	A	1556	MET
1	A	1590	LEU
1	A	1674	LEU
1	A	1699	THR
1	A	1774	MET
1	A	1853	VAL
1	A	1878	CYS
1	A	2041	LEU
1	A	2131	TYR
1	A	2135	PHE
1	A	2211	PHE
1	A	2307	MET
1	A	2397	LEU
1	A	2427	GLU
1	A	2543	PHE
1	A	2546	LEU
1	A	2563	VAL
1	A	2585	MET
1	A	2628	HIS
1	A	2642	VAL
1	A	2765	LEU
1	A	2976	VAL
1	A	3004	VAL
1	A	3097	VAL
1	A	3120	PHE
1	A	3155	HIS
1	A	3217	LEU
1	A	3265	MET
1	A	3268	HIS
1	A	3325	LEU
1	A	3349	LEU
1	A	3350	VAL
1	A	3364	THR
1	A	3415	THR
1	A	3539	GLU
1	A	3550	VAL
1	A	3595	LEU
1	A	3652	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3709	LEU
1	A	3833	LEU
1	A	3976	ILE
1	A	4013	HIS
1	A	4254	VAL
1	A	4270	MET
1	A	4504	VAL
1	A	4590	HIS
1	A	4604	VAL
1	A	4802	ASP
1	A	4919	ILE
1	A	4953	THR
1	A	5007	LEU
1	A	5082	LEU
1	A	5103	LEU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (48) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	514	GLN
1	A	715	GLN
1	A	766	GLN
1	A	782	ASN
1	A	1044	ASN
1	A	1169	ASN
1	A	1282	ASN
1	A	1371	GLN
1	A	1595	ASN
1	A	1746	GLN
1	A	1812	GLN
1	A	1816	GLN
1	A	1898	HIS
1	A	1968	HIS
1	A	2138	GLN
1	A	2160	GLN
1	A	2184	ASN
1	A	2295	ASN
1	A	2451	ASN
1	A	2655	HIS
1	A	2712	ASN
1	A	2867	ASN
1	A	3013	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	3035	GLN
1	A	3066	ASN
1	A	3136	ASN
1	A	3260	GLN
1	A	3365	GLN
1	A	3502	ASN
1	A	3514	ASN
1	A	3532	HIS
1	A	3671	GLN
1	A	3890	HIS
1	A	4094	HIS
1	A	4301	ASN
1	A	4313	GLN
1	A	4337	HIS
1	A	4342	GLN
1	A	4543	HIS
1	A	4573	GLN
1	A	4634	HIS
1	A	4701	GLN
1	A	4842	GLN
1	A	4846	ASN
1	A	4883	GLN
1	A	4909	GLN
1	A	5094	ASN
1	A	5096	ASN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry

Of 5 ligands modelled in this entry, 3 are monoatomic - leaving 2 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. 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 $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	ATP	A	5201	3	26,33,33	0.64	0	31,52,52	0.85	2 (6%)
2	ATP	A	5205	-	26,33,33	0.62	0	31,52,52	0.81	2 (6%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the Chemical Component Dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	ATP	A	5201	3	-	5/18/38/38	0/3/3/3
2	ATP	A	5205	-	-	4/18/38/38	0/3/3/3

There are no bond length outliers.

All (4) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	A	5201	ATP	C5-C6-N6	2.28	123.82	120.35
2	A	5205	ATP	C5-C6-N6	2.26	123.79	120.35
2	A	5201	ATP	C3'-C2'-C1'	2.21	104.31	100.98
2	A	5205	ATP	PB-O3B-PG	2.06	139.91	132.83

There are no chirality outliers.

All (9) torsion outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	5205	ATP	PB-O3B-PG-O1G
2	A	5205	ATP	PB-O3B-PG-O2G
2	A	5201	ATP	C5'-O5'-PA-O3A
2	A	5201	ATP	PA-O3A-PB-O2B

Continued on next page...

Continued from previous page...

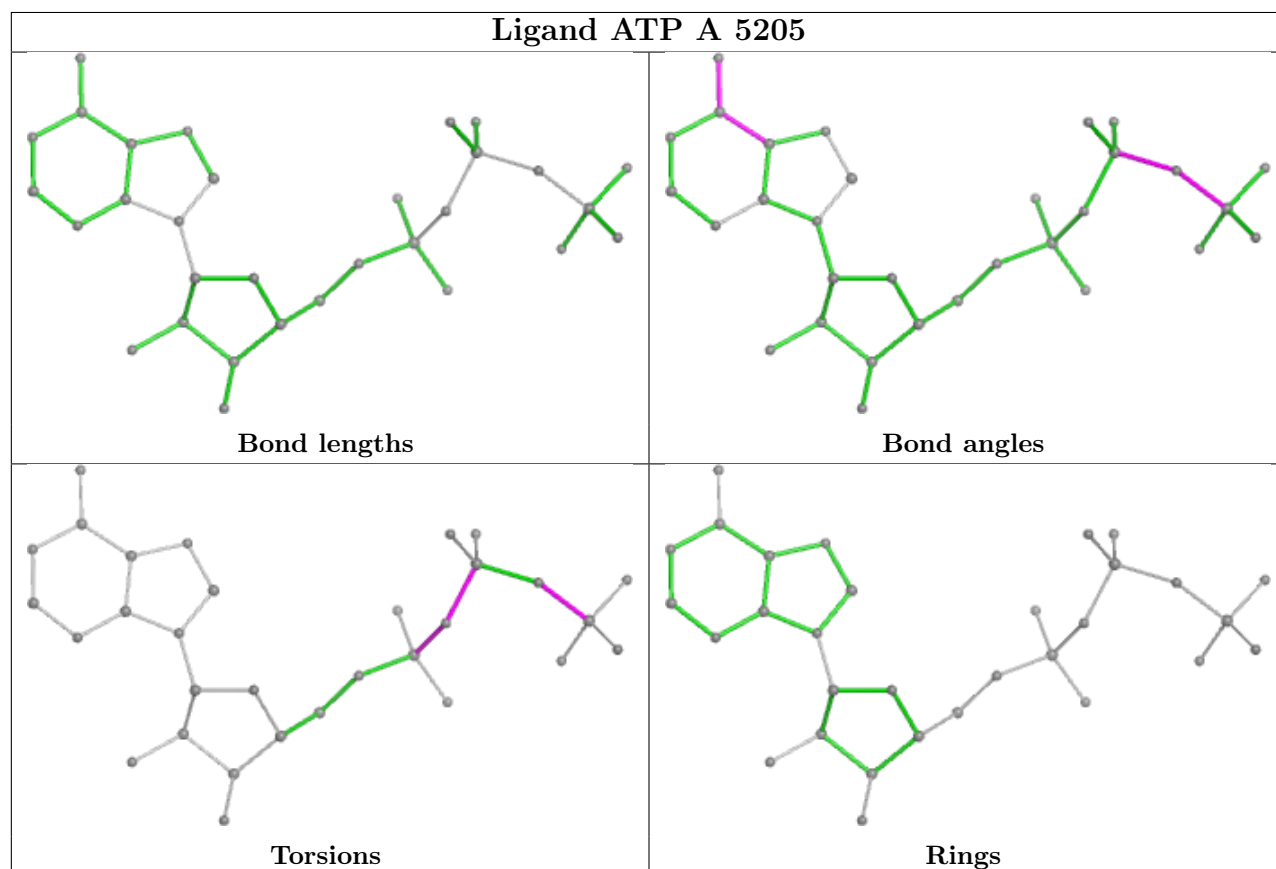
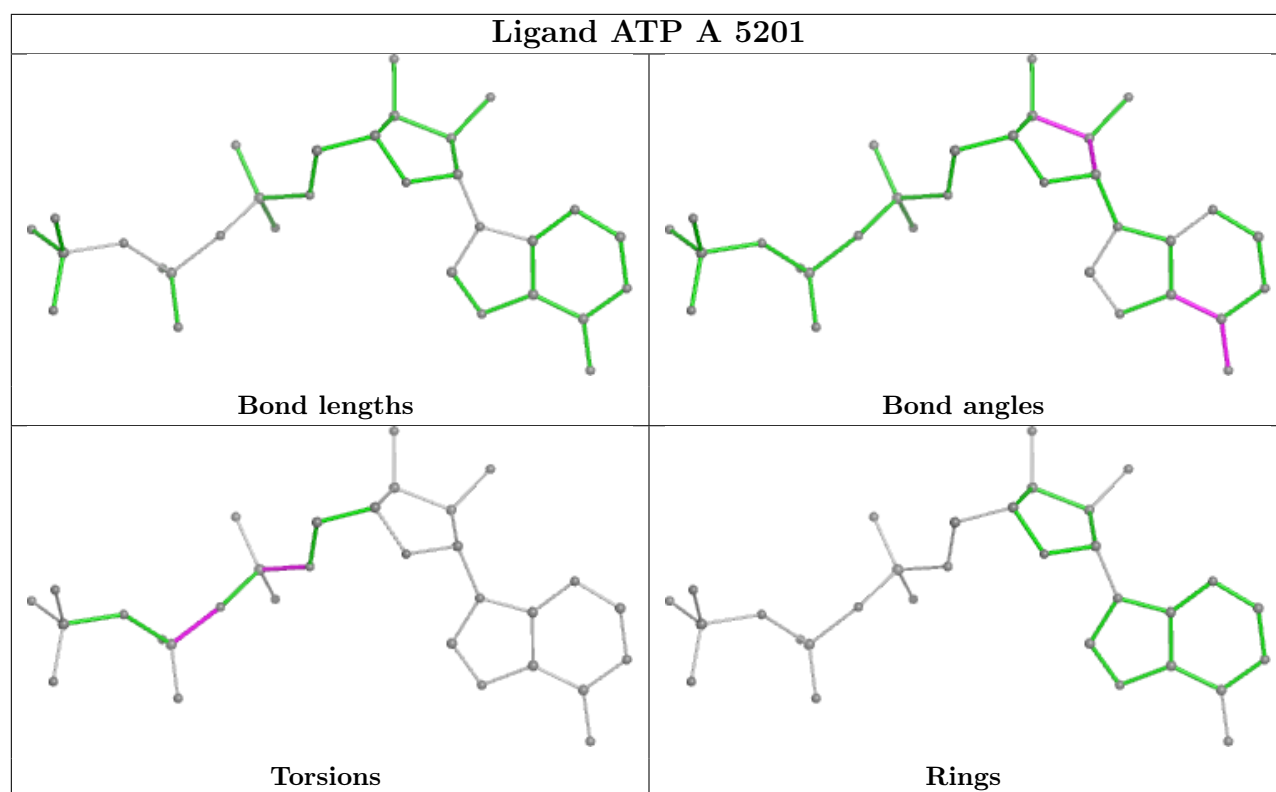
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	5205	ATP	PA-O3A-PB-O1B
2	A	5201	ATP	C5'-O5'-PA-O1A
2	A	5205	ATP	PB-O3A-PA-O2A
2	A	5201	ATP	PA-O3A-PB-O1B
2	A	5201	ATP	C5'-O5'-PA-O2A

There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 11 short contacts:

Mol	Chain	Res	Type	Clashes	Symm-Clashes
2	A	5201	ATP	4	0
2	A	5205	ATP	7	0

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



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.

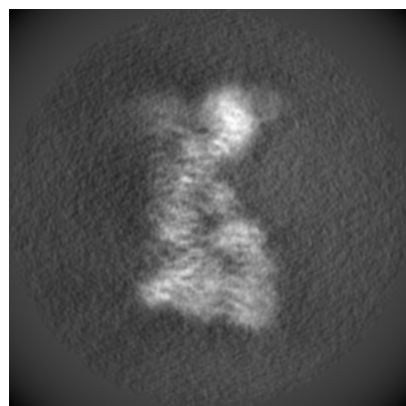
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-52570. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

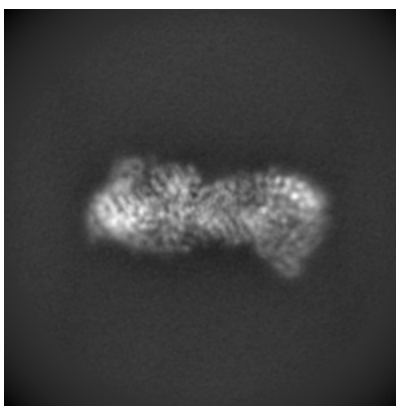
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

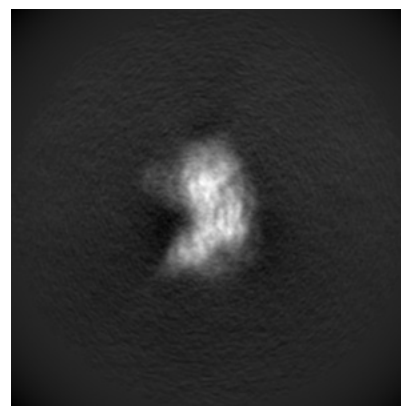
6.1.1 Primary map



X

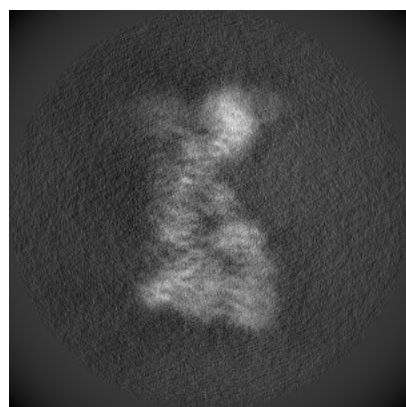


Y

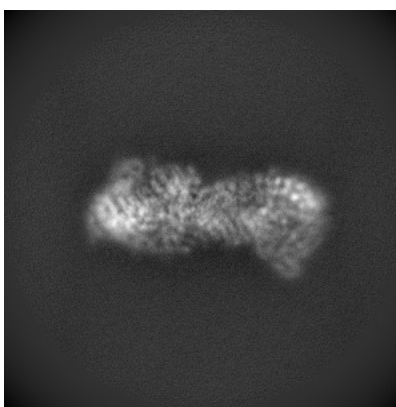


Z

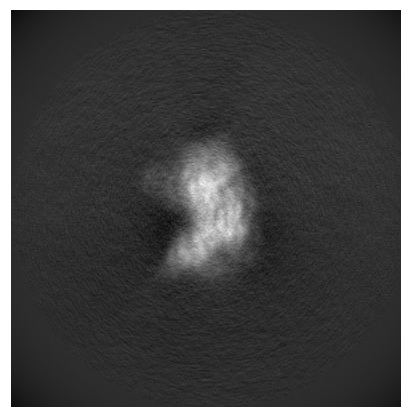
6.1.2 Raw map



X



Y

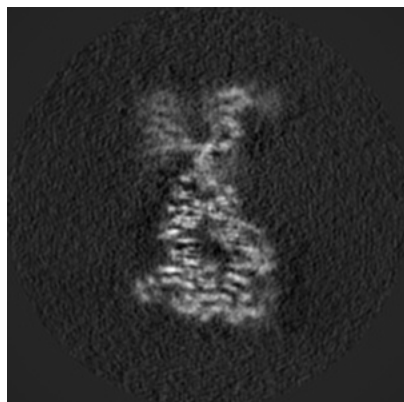


Z

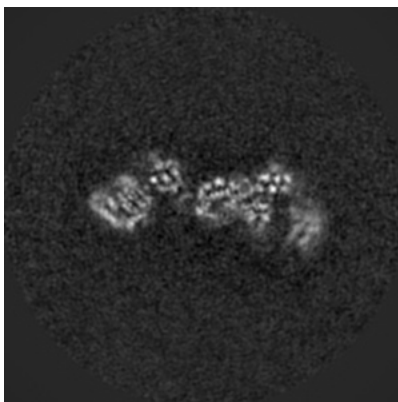
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

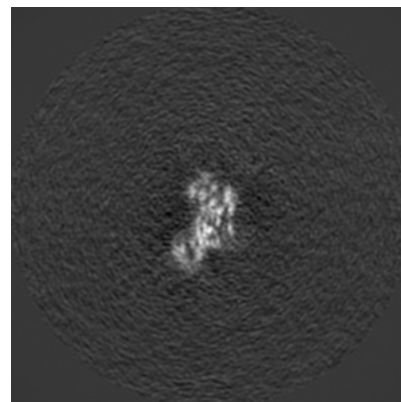
6.2.1 Primary map



X Index: 176

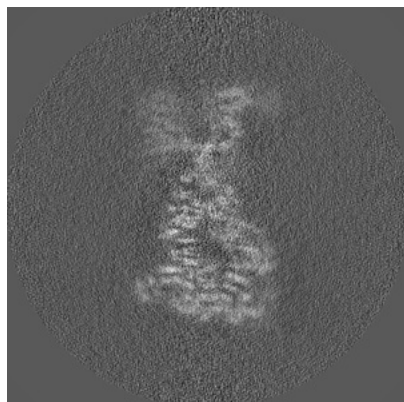


Y Index: 176

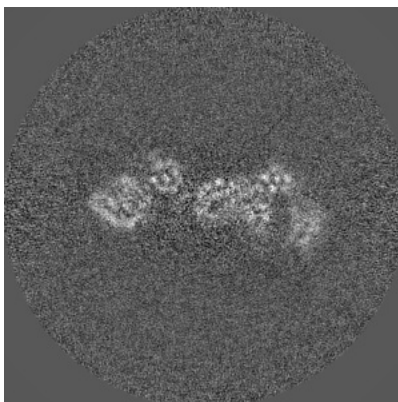


Z Index: 176

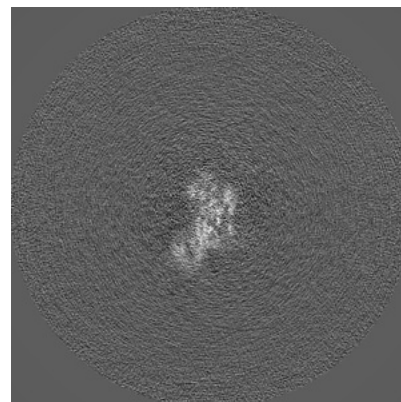
6.2.2 Raw map



X Index: 176



Y Index: 176

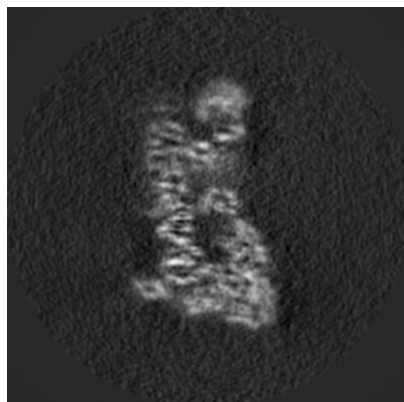


Z Index: 176

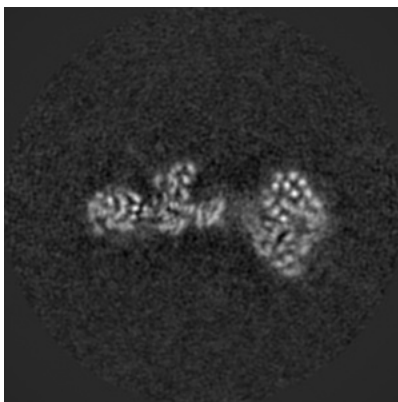
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

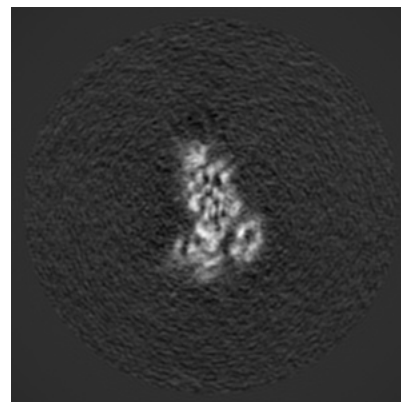
6.3.1 Primary map



X Index: 168

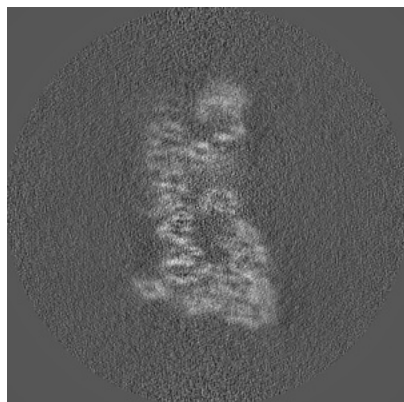


Y Index: 197

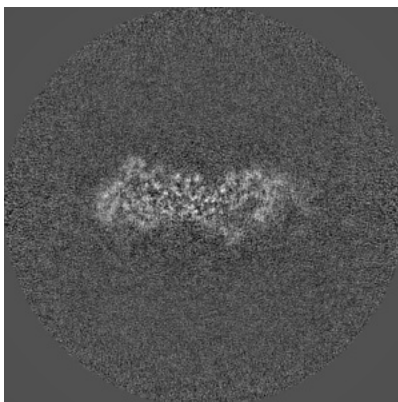


Z Index: 110

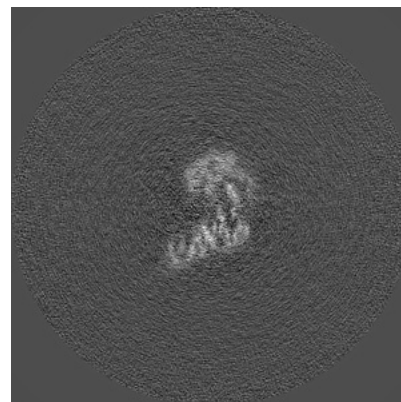
6.3.2 Raw map



X Index: 168



Y Index: 160

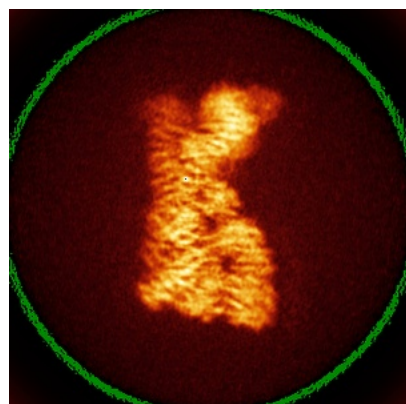


Z Index: 155

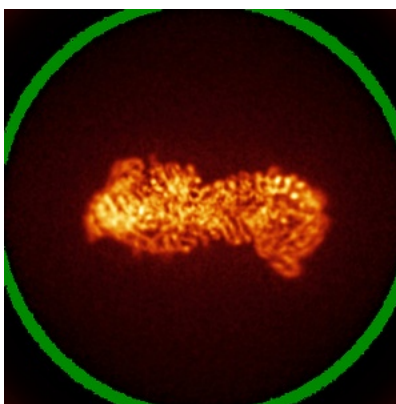
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

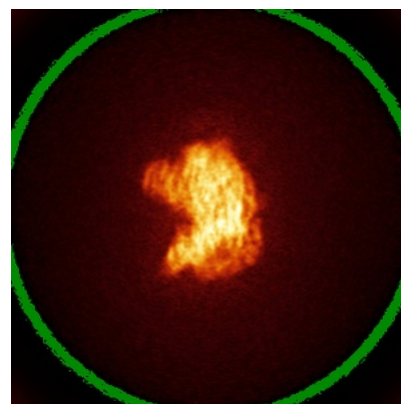
6.4.1 Primary map



X

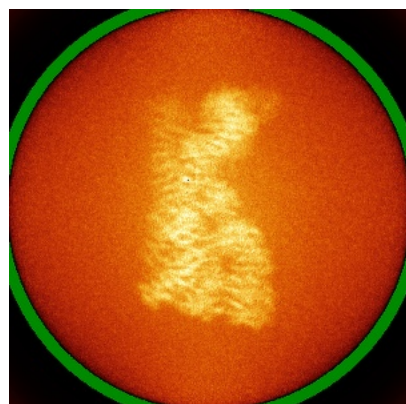


Y

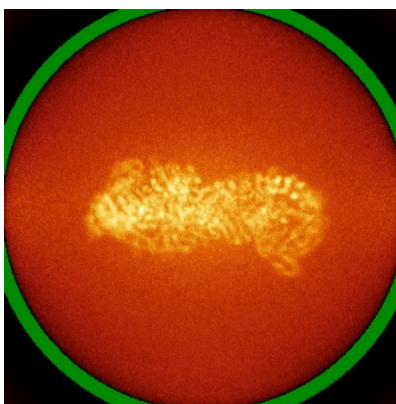


Z

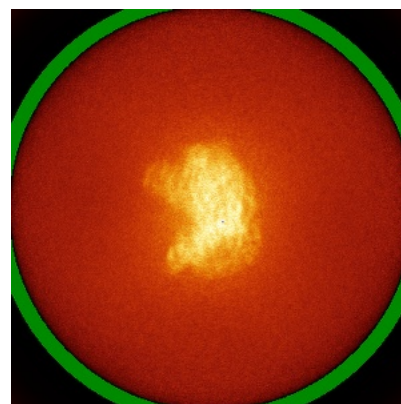
6.4.2 Raw map



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.

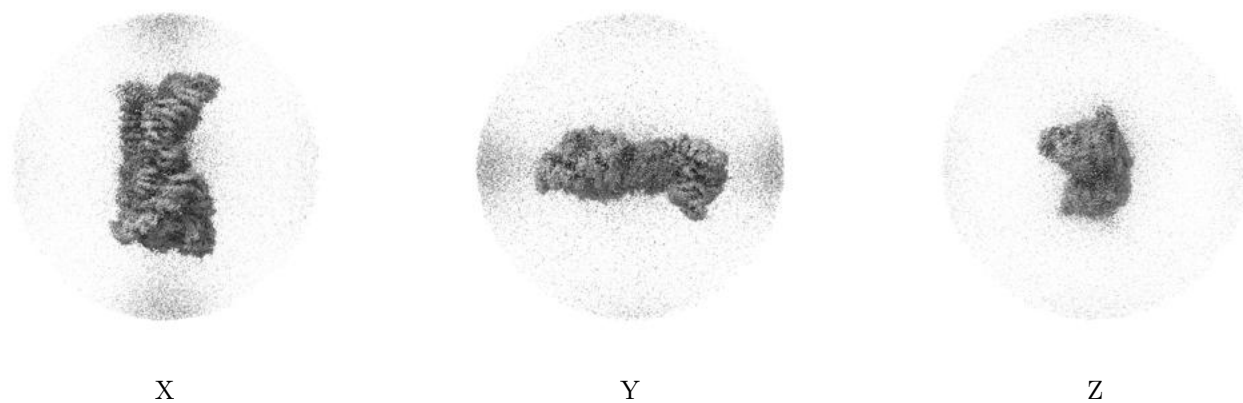
6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.00484. 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.

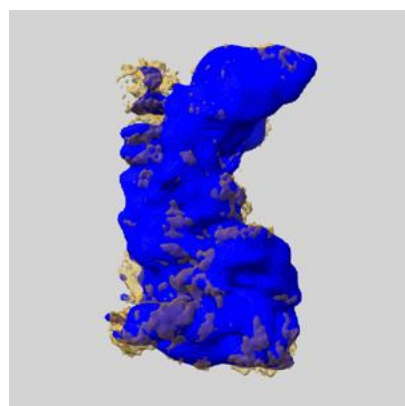
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

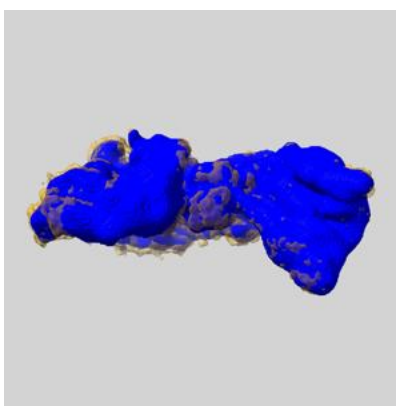
A mask typically either:

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

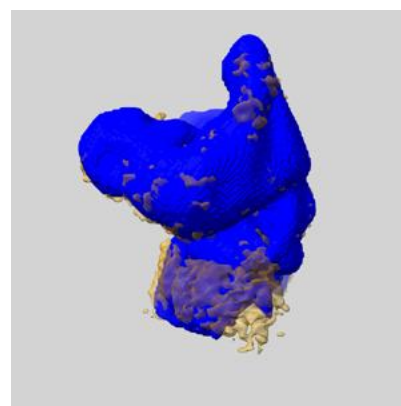
6.6.1 emd_52570_msk_1.map [i](#)



X



Y

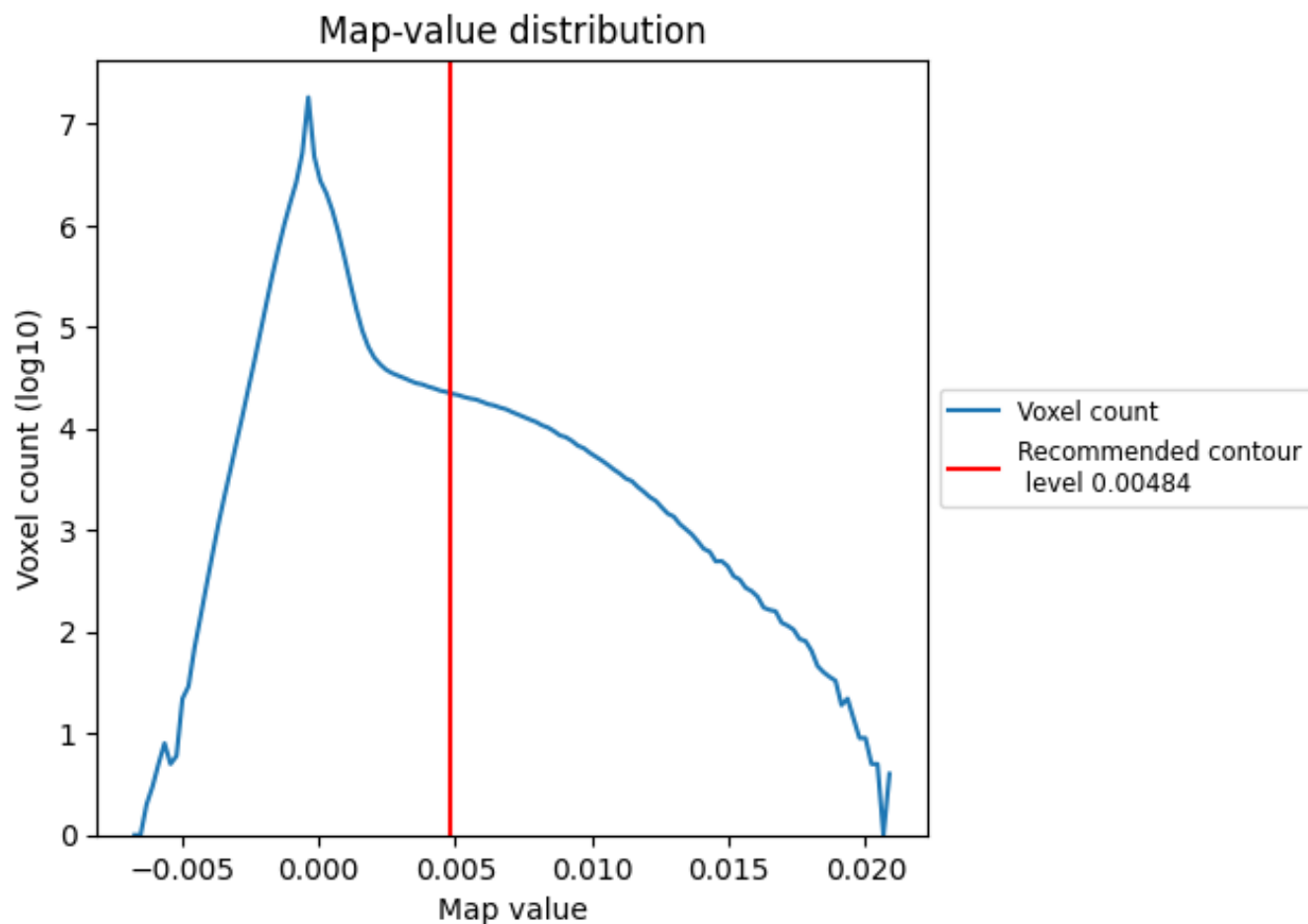


Z

7 Map analysis [i](#)

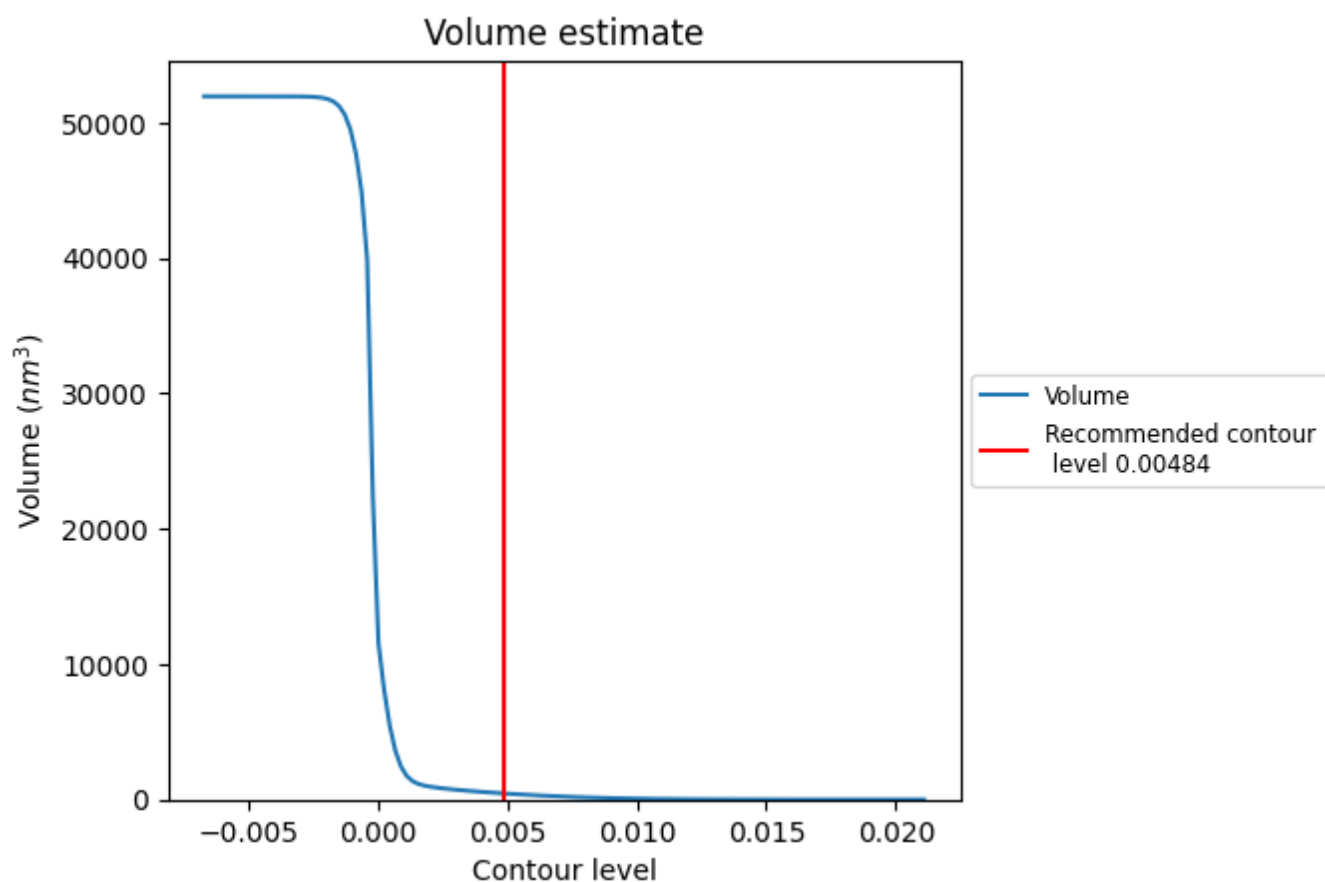
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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.

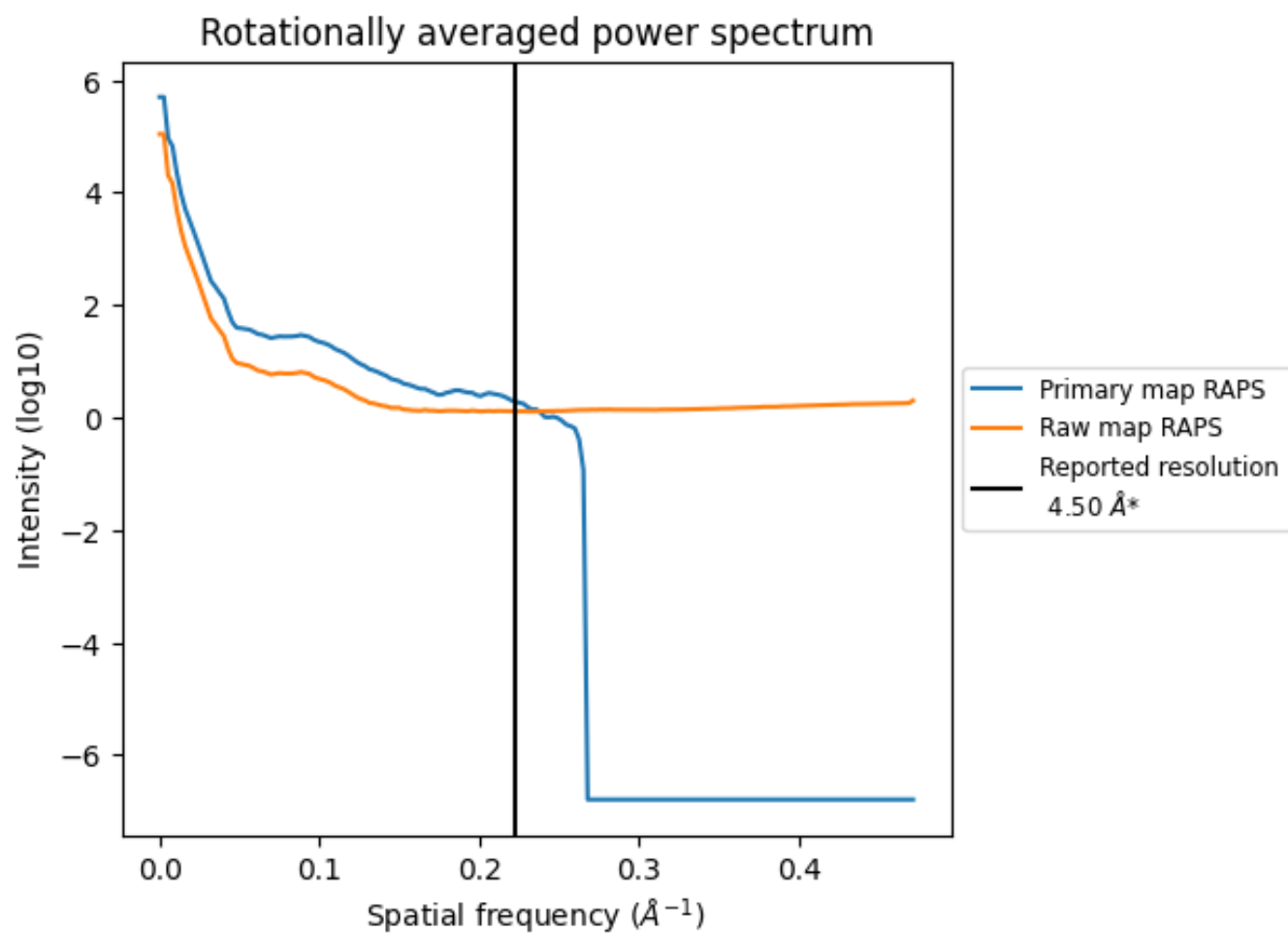
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 455 nm³; this corresponds to an approximate mass of 411 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 ⓘ

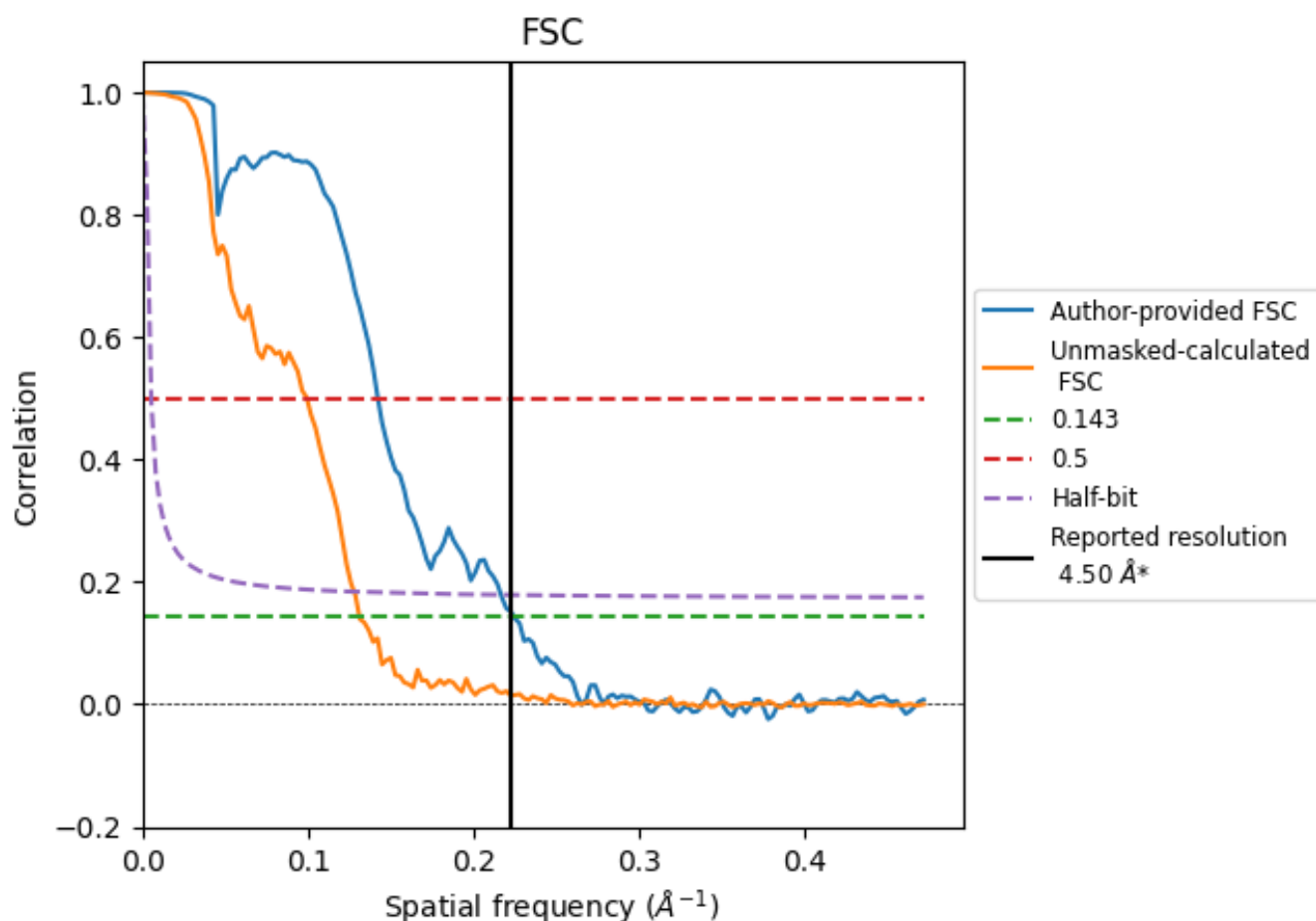


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.222 \AA^{-1}

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 0.222 \AA^{-1}

8.2 Resolution estimates [i](#)

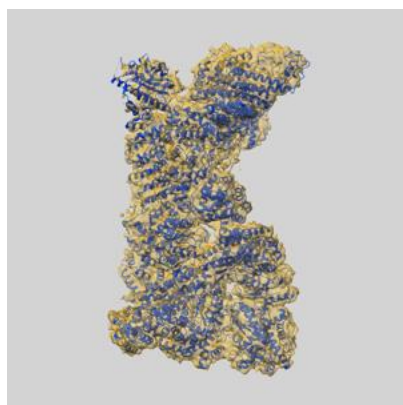
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	4.50	-	-
Author-provided FSC curve	4.46	7.03	4.62
Unmasked-calculated*	7.63	10.07	7.82

*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 7.63 differs from the reported value 4.5 by more than 10 %

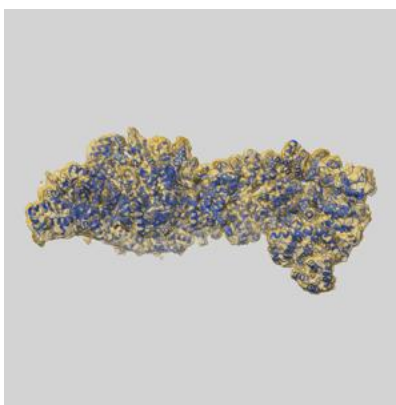
9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-52570 and PDB model 9I1I. Per-residue inclusion information can be found in [section 3](#) on [page 5](#).

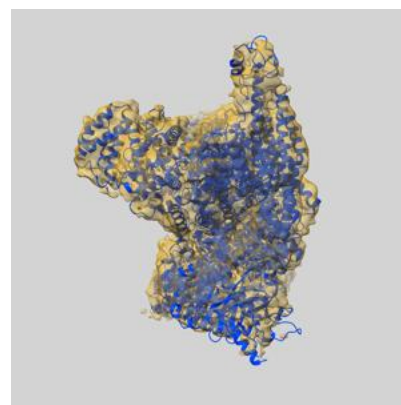
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



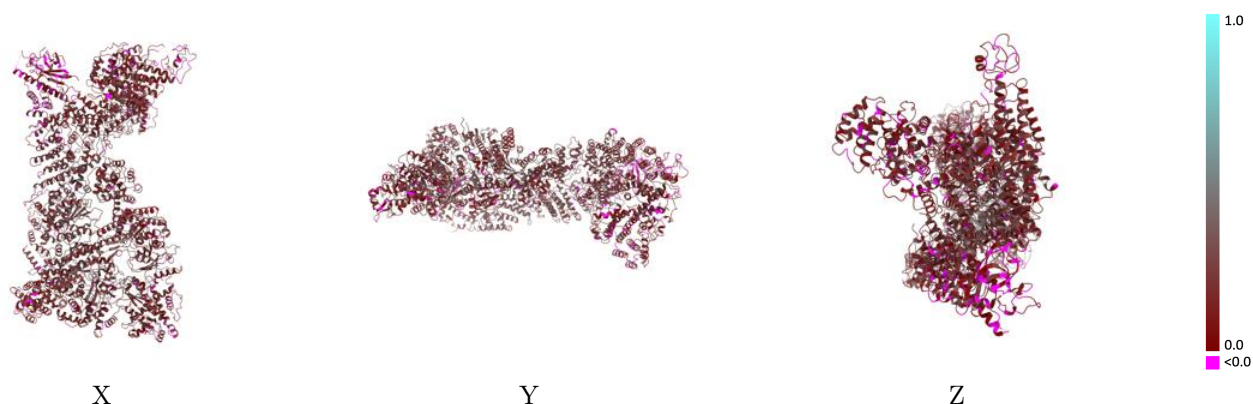
Y



Z

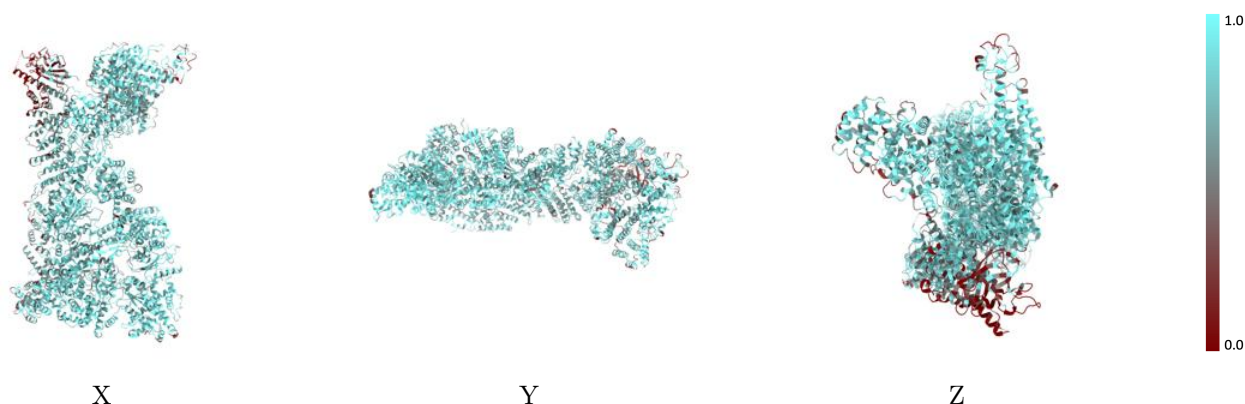
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.00484 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



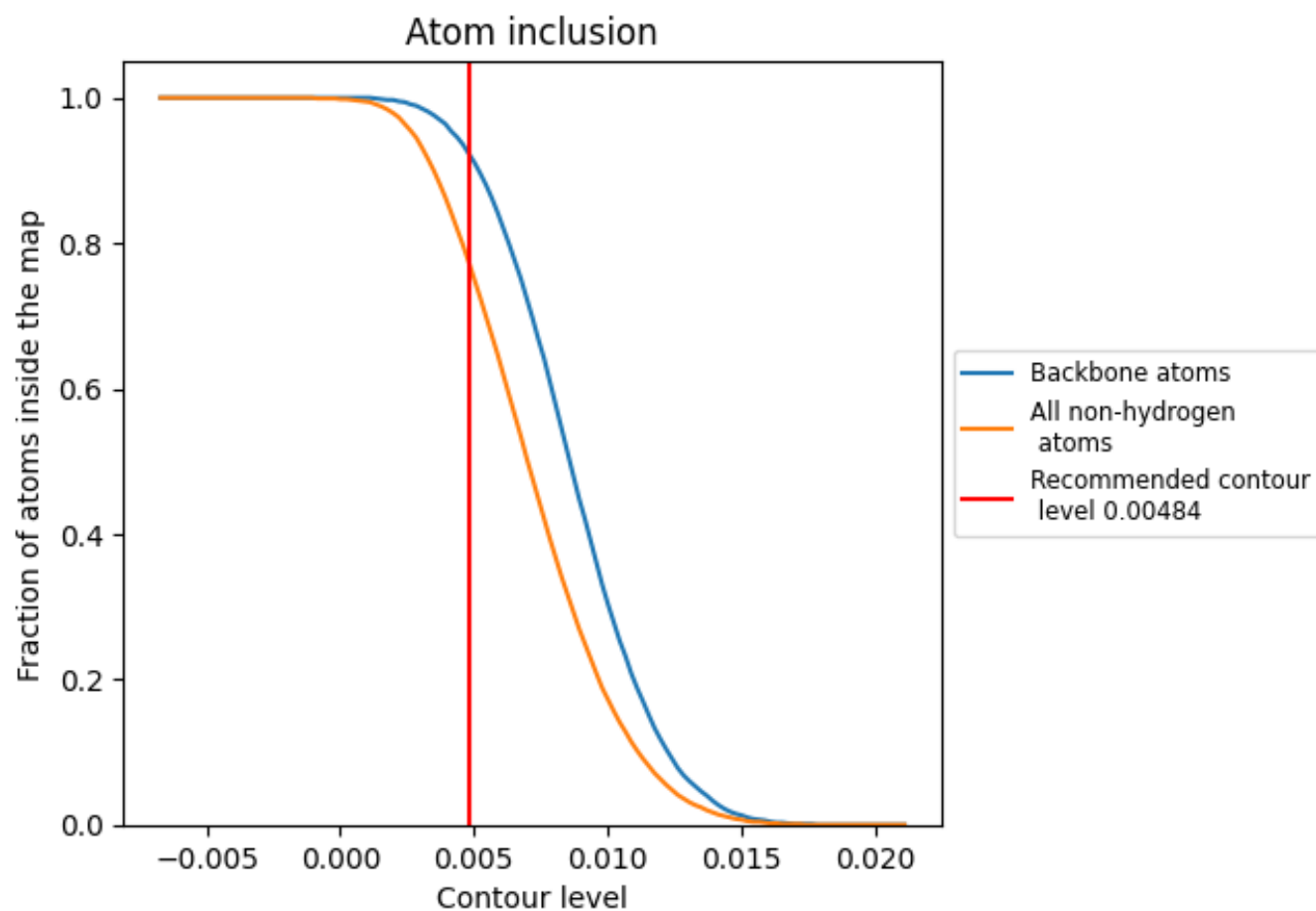
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.00484).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 92% of all backbone atoms, 77% 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 (0.00484) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	<div></div> 0.7700	<div></div> 0.2080
A	<div></div> 0.7700	<div></div> 0.2080

