



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 10, 2026 – 09:53 AM UTC

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.dev132
Mogul : 2022.3.0, CSD as543be (2022)
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Buster-report : wwPDB partial adaption of 1.1.7 (2018)
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

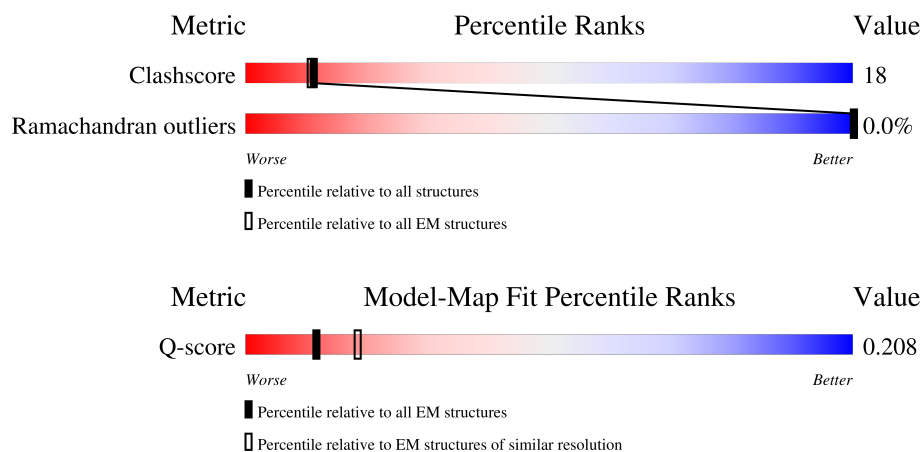
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 4.50 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	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
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.

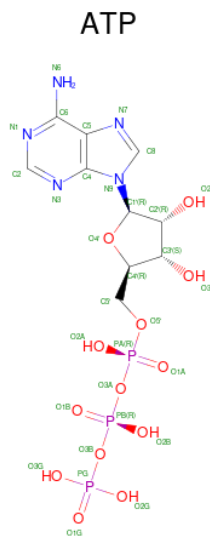
- Molecule 1 is a protein called E3 ubiquitin-protein ligase RNF213.

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	0
			1	1	

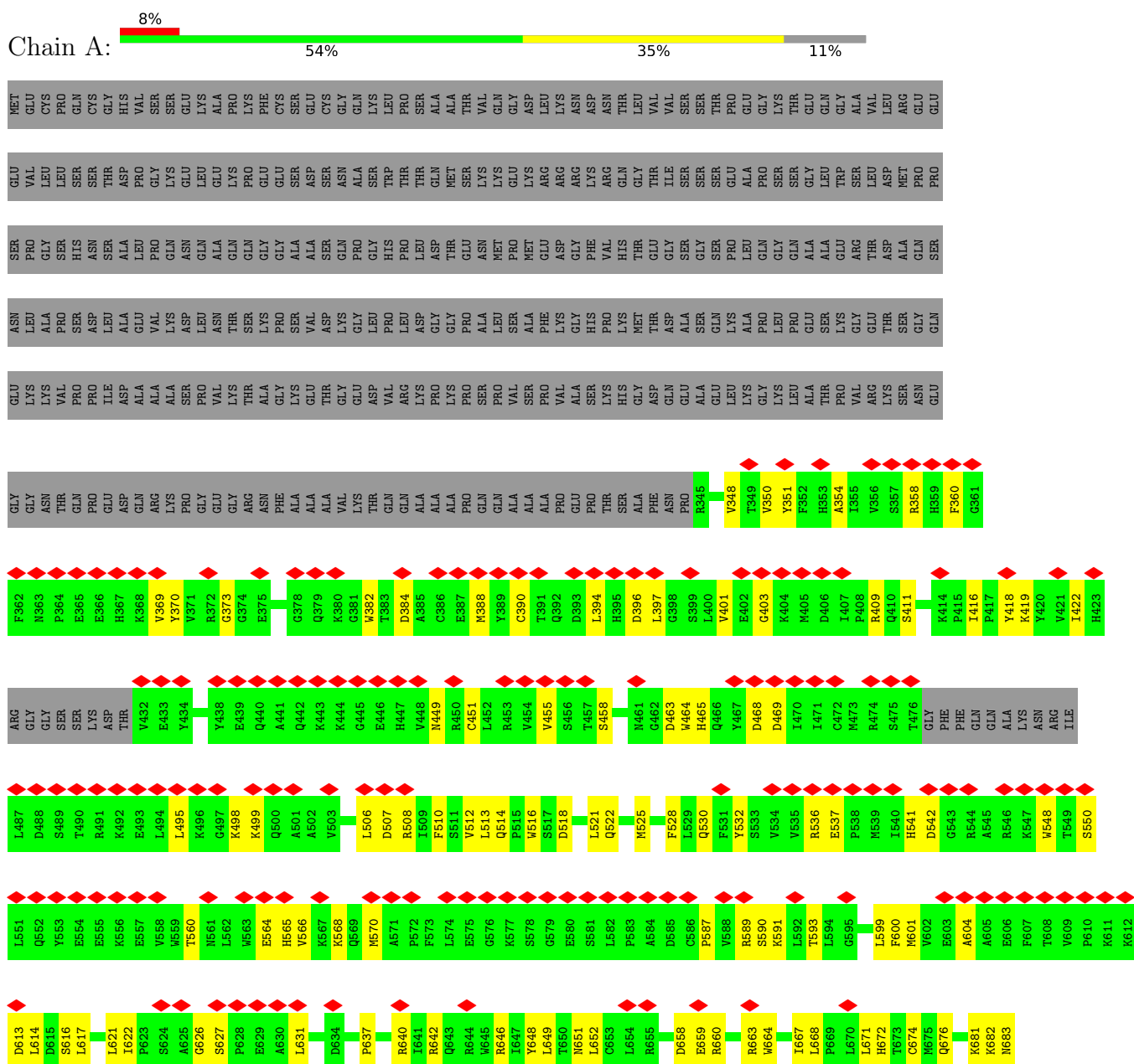
- Molecule 4 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

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



E1685	A1686	A1687	L1688	M1689	M1690	L1691	S1692	K1697	K1698	T1699	V1700	V1704	Q1705	A1706	T1707	C1710	K1713	A1714	D1715	Y1716	C1717	L1718	L1719	L1720	E1721	V1722	M1723	K1724	K1725	Q1729	L1730	E1733	L1736	M1737	G1738	K1739	L1740	V1741	A1742	I1743	M1744	S1747	L1748	V1749	Y1750	M1751	S1752	A1753	L1754	L1755	P1756				
R1599	T1600	W1601	T1602	N1616	F1617	G1618	L1619	E1620	L1621	S1622	S1623	Q1624	L1625	D1630	V1631	T1632	Q1633	C1639	R1640	E1643	D1644	L1645	L1646	E1649	V1650	V1652	K1656	R1657	A1658	E1659	H1660	F1661	Y1662	L1663	N1664	Y1666	T1667	A1668	Q1670	L1671	V1672	Y1673	L1674	S1675	E1676	S1677	L1678	R1679	K1680	S1684					
G1416	E1417	N1418	D1419	H1429	Q1433	G1434	Y1435	R1445	D1450	H1454	L1455	Q1456	E1457	L1458	W1459	R1460	L1468	P1469	D1470	K1471	D1474	S1475	A1476	R1477	N1478	W1481	L1482	K1483	T1484	H1489	G1490	S1491	V1492	E1493	L1494	S1495	S1498	L1499	T1503	V1508	Y1509	V1510	I1511	E1512	G1517										
I1520	R1527	L1528	L1529	L1530	P1531	D1532	GLY	HIS	GLY	TYR	P1537	E1538	A1539	L1540	Y1543	L1548	E1549	E1550	L1551	M1553	K1554	L1555	M1556	L1557	M1558	S1559	G1560	K1561	H1564	S1566	N1567	T1568	E1569	V1570	P1571	R1572	E1575	M1580	Q1581	R1582	H1585	L1588	K1589	L1590	H1591	L1596	M1597	L1598							
L1520	R1527	L1528	L1529	L1530	P1531	D1532	GLY	HIS	GLY	TYR	P1537	E1538	A1539	L1540	Y1543	L1548	E1549	E1550	L1551	M1553	K1554	L1555	M1556	L1557	M1558	S1559	G1560	K1561	H1564	S1566	N1567	T1568	E1569	V1570	P1571	R1572	E1575	M1580	Q1581	R1582	H1585	L1588	K1589	L1590	H1591	L1596	M1597	L1598							
V1325	R1326	R1327	A1328	L1329	T1332	G1333	D1334	F1335	S1336	L1341	F1344	E1349	D1350	F1351	E1354	LYS	LEU	ASP	GLN	ILE	P1360	Q1362	F1363	I1364	K1365	Q1368	L1369	L1370	Q1371	D1372	I1373	S1374	P1375	P1376	R1377	Q1378	C1380	L1381	E1382	E1383	R1386	L1390	W1393	L1394	V1398	V1510	I1511	D1400	L1401	H1402					
L1252	Y1253	E1254	A1255	SER	S1180	H1186	L1189	D1192	L1193	R1194	E1195	S1198	K1199	L1200	D1201	S1202	L1203	K1204	D1205	S1206	H1207	Q1210	D1211	F1212	W1213	T1216	N1221	THR	LEU	ASP	LYS	ARG	E1229	L1230	V1232	S1233	L1234	P1235	L1238	E1239	M1243	P1244	G1245	F1249	L1168										
L1087	E1088	H1089	Q1090	SER	S1091	Q1092	F1093	I1096	W1097	R1101	R1102	R1103	LEU	PRO	SER	GLN	GLU	LYS	ALA	CYS	D1112	W1113	R1114	S1115	K1118	R1119	R1120	R1121	L1124	L1127	L1128	Q1129	E1130	T1052	R1056	PRO	M1059	V1065	V1069	A1070	L1073	Q1076	T1077	V1080	G1081	Q1082	L1083	E1084	V1005	L1085	I1086				
S1009	W1010	P1011	H1012	H1013	W1014	G1015	E1016	P1017	L1018	F1019	D1020	V1021	F1025	K1026	Y1027	L1028	L1029	K1030	W1031	P1032	D1033	V1034	L1037	L1040	T1043	M1044	E1045	K1046	R1049	C971	L1050	I1051	T1052	R1056	PRO	M1059	V1065	V1069	A1070	L1073	Q1076	T1077	V1080	G1081	Q1082	L1083	E1084	V1005	L1085	I1086					
R914	E917	E922	E923	GLY	HIS	THR	ASP	GLU	GLY	PRO	E863	K864	Y866	R870	T871	S872	T873	L874	Q875	E876	A877	L878	A879	T880	T881	W884	L885	R886	S887	L888	P889	K890	S891	R892	M893	L894	S895	E898	S898	L990	S899	Q996	K997	F998	L1001	L1002	S1003	A1004	M909	V1005	A910	L1006	V911	T1007	K1008
K847	L848	L849	P854	GLY	HIS	THR	ASP	GLU	GLY	PRO	E863	K864	Y866	R870	T871	S872	T873	L874	Q875	E876	A877	L878	A879	T880	T881	W884	L885	R886	S887	L888	P889	K890	S891	R892	M893	L894	S895	E898	S898	L990	S899	Q996	K997	F998	L1001	L1002	S1003	A1004	M909	V1005	A910	L1006	V911	T1007	K1008
Q767	I768	Y770	P771	L772	F773	G774	L775	R776	K777	I778	S779	G780	W783	K784	K785	D786	Y787	E788	W789	K792	M793	L794	M795	H796	L797	I800	Y801	Q802	R803	R804	I805	F806	L815	E828	E817	C818	L819	H822	E823	N827	I828	T829	A830	N831	H832	Q833	F834	W759	R760	L844	I845	C846	L765	Q766	







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 (Å)	373.12, 373.12, 373.12	wwPDB
Map dimensions	352, 352, 352	wwPDB
Map angles (°)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing (Å)	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, ZN, ATP

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 [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	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 [i](#)

There are no protein residues with a non-rotameric sidechain to report in this entry.

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

Of 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	5205	-	32,33,33	0.49	1 (3%)	48,52,52	0.38	0
2	ATP	A	5201	3	32,33,33	0.53	0	48,52,52	0.40	0

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	5205	-	-	6/22/38/38	0/3/3/3
2	ATP	A	5201	3	-	4/22/38/38	0/3/3/3

All (1) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
2	A	5205	ATP	PA-O3A	-2.03	1.57	1.59

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

All (10) torsion outliers are listed below:

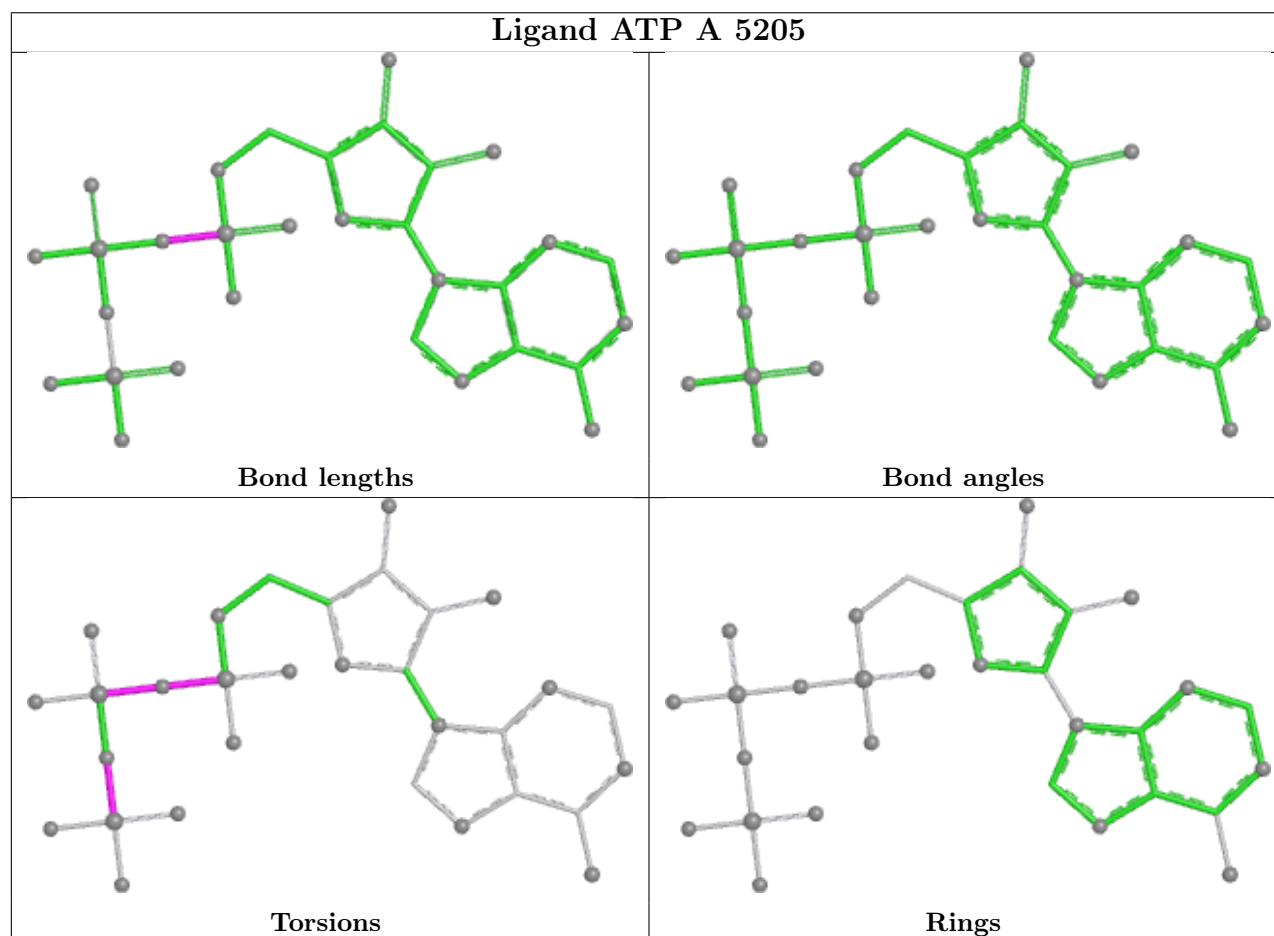
Mol	Chain	Res	Type	Atoms
2	A	5201	ATP	C5'-O5'-PA-O1A
2	A	5205	ATP	PB-O3B-PG-O1G
2	A	5205	ATP	PB-O3B-PG-O2G
2	A	5201	ATP	PA-O3A-PB-O2B
2	A	5205	ATP	PA-O3A-PB-O1B
2	A	5201	ATP	C5'-O5'-PA-O3A
2	A	5205	ATP	PB-O3A-PA-O2A
2	A	5201	ATP	PA-O3A-PB-O1B
2	A	5205	ATP	PA-O3A-PB-O2B
2	A	5205	ATP	PB-O3A-PA-O1A

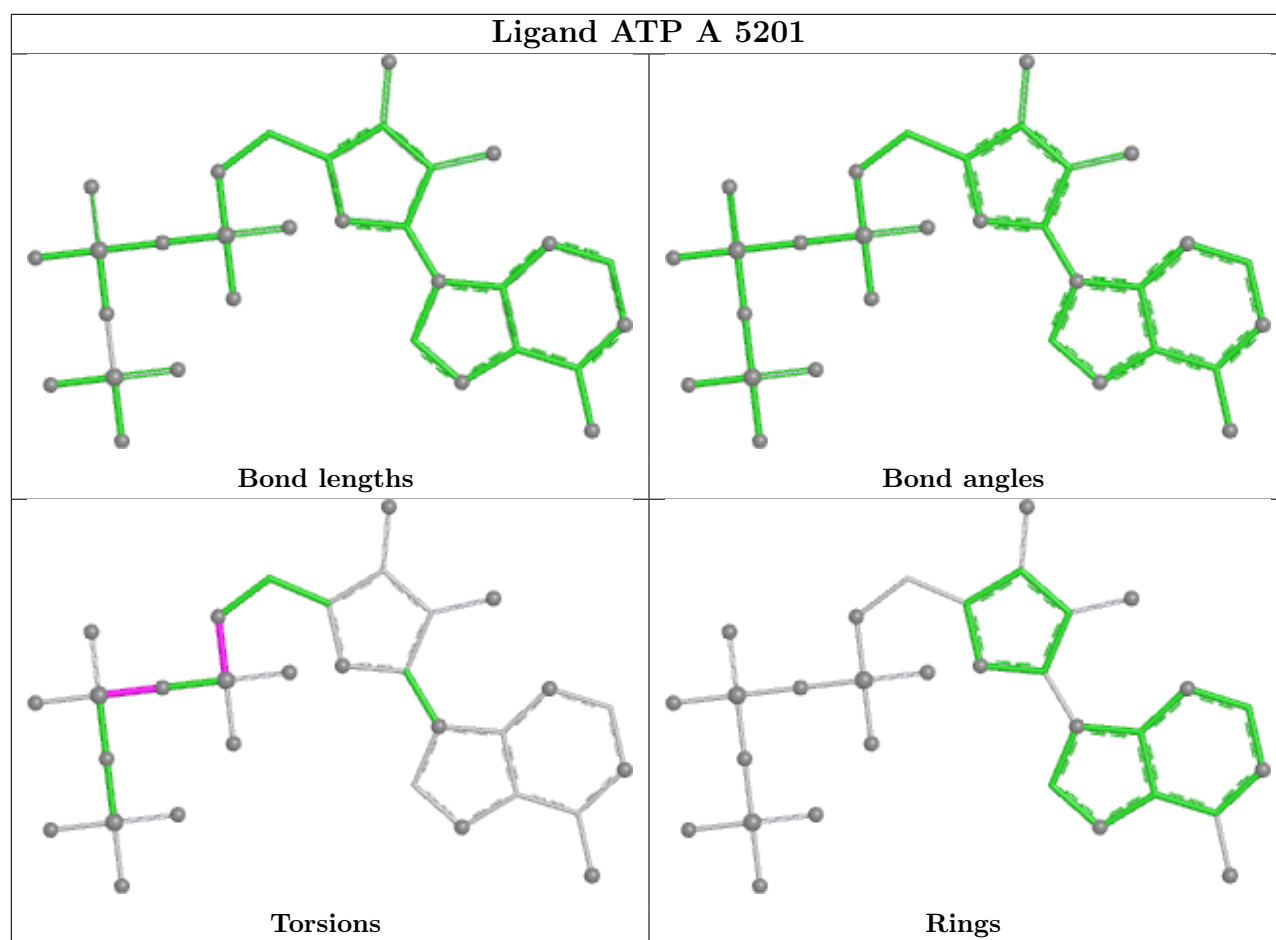
There are no ring outliers.

2 monomers are involved in 11 short contacts:

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

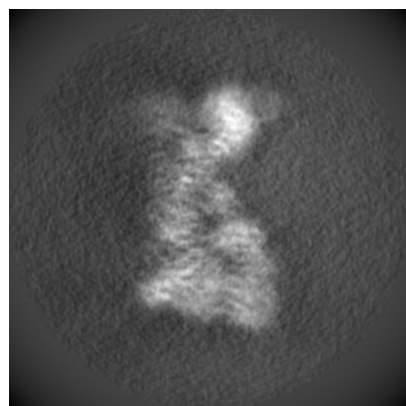
6 Map visualisation [i](#)

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.

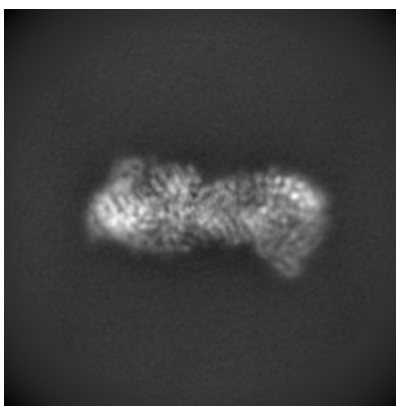
Images derived from a raw map, generated by summing the deposited half-maps, are presented below the corresponding image components of the primary map to allow further visual inspection and comparison with those of the primary map.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

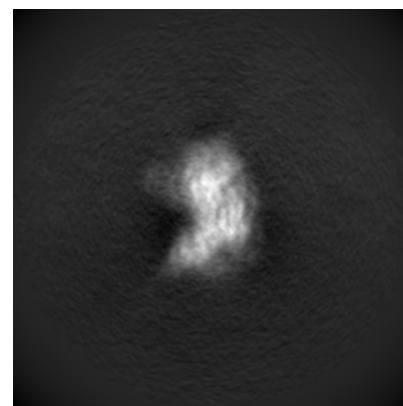
6.1.1 Primary map



X

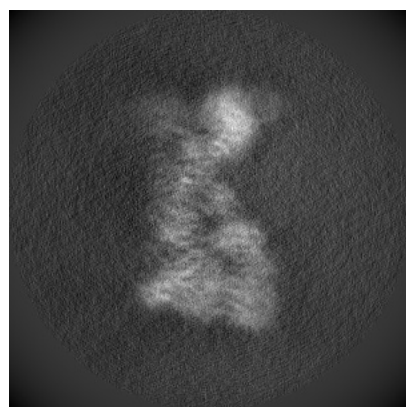


Y

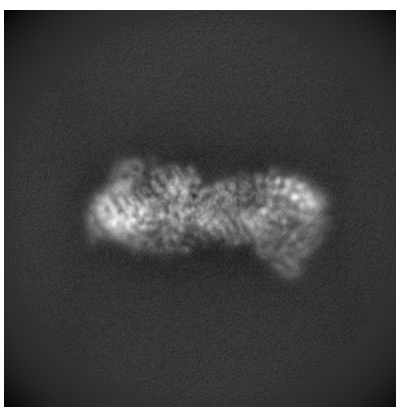


Z

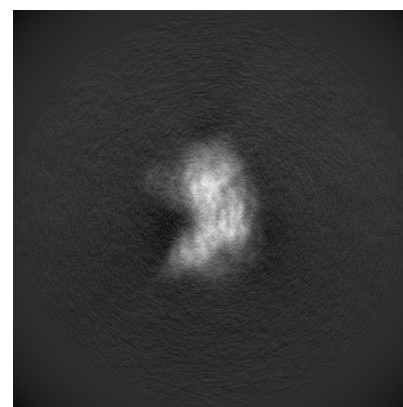
6.1.2 Raw map



X



Y

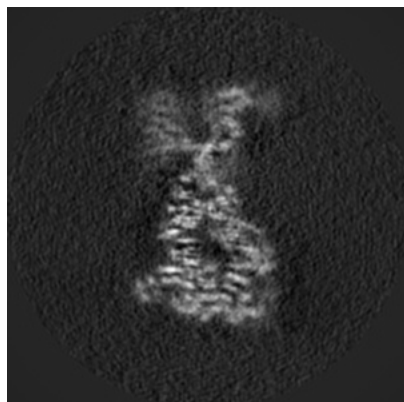


Z

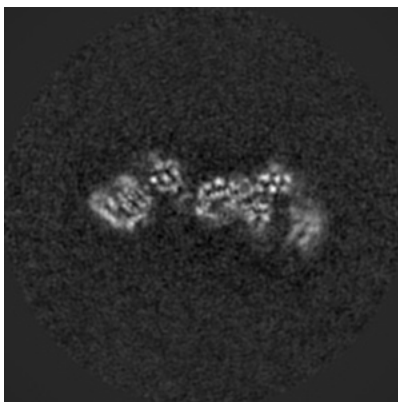
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

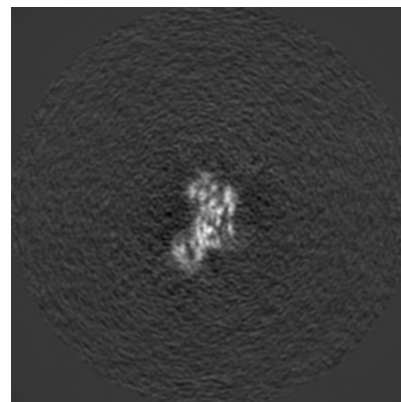
6.2.1 Primary map



X Index: 176

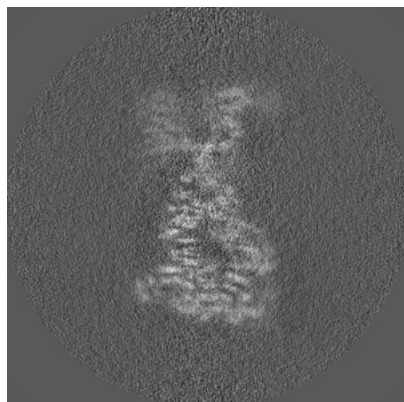


Y Index: 176

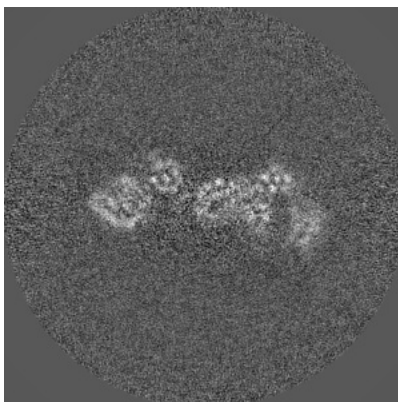


Z Index: 176

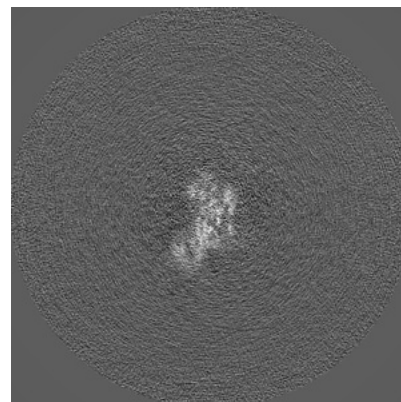
6.2.2 Raw map



X Index: 176



Y Index: 176

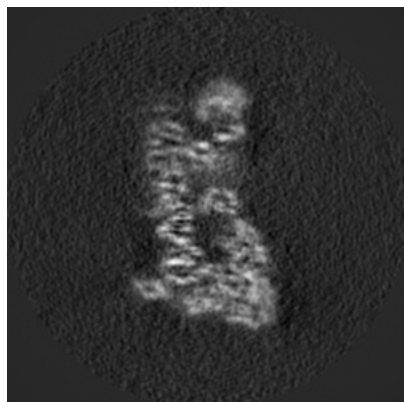


Z Index: 176

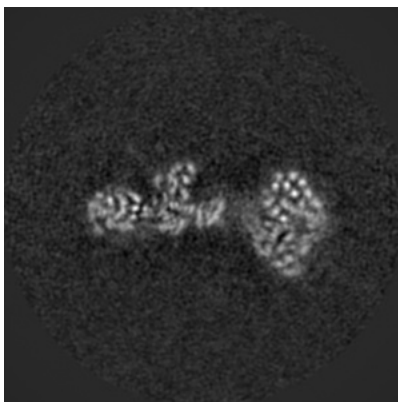
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

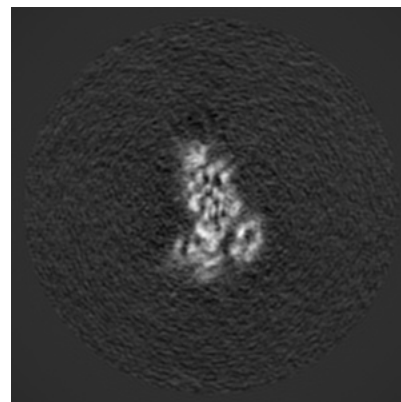
6.3.1 Primary map



X Index: 168

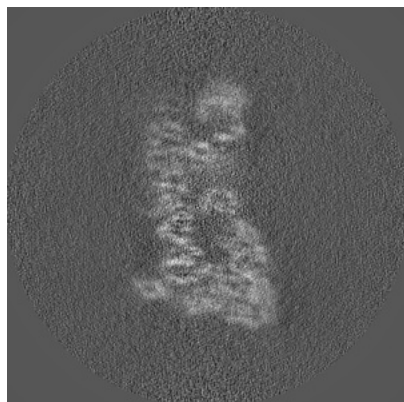


Y Index: 197

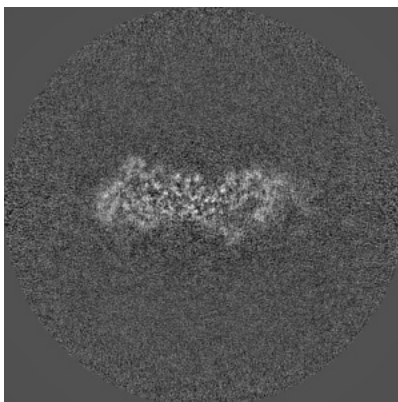


Z Index: 110

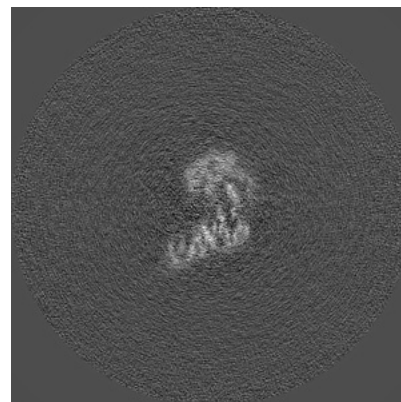
6.3.2 Raw map



X Index: 168



Y Index: 160

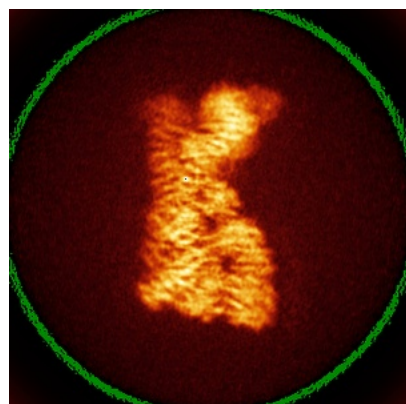


Z Index: 155

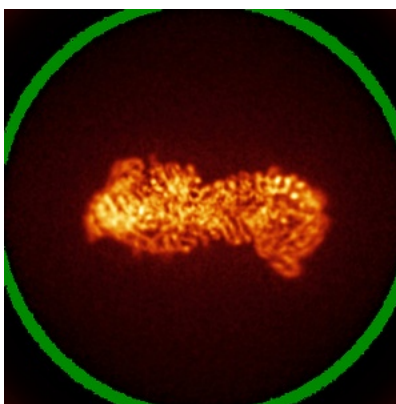
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

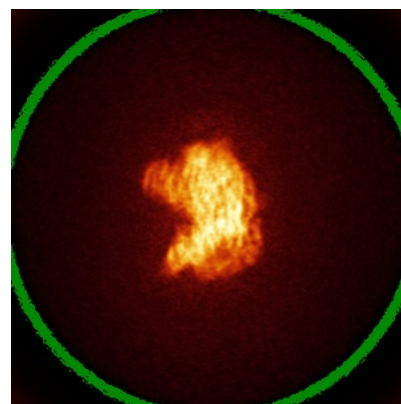
6.4.1 Primary map



X

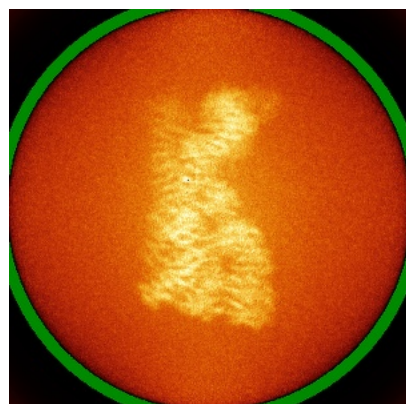


Y

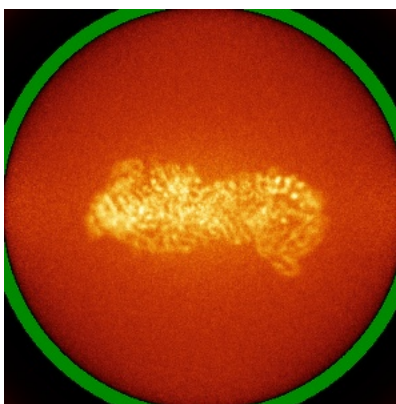


Z

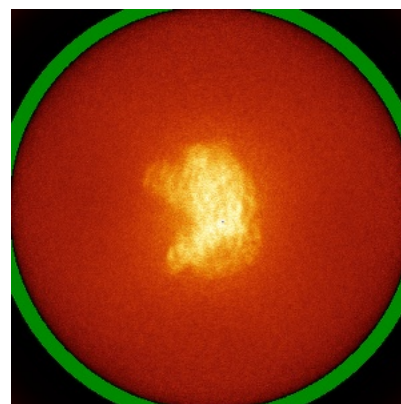
6.4.2 Raw map



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.

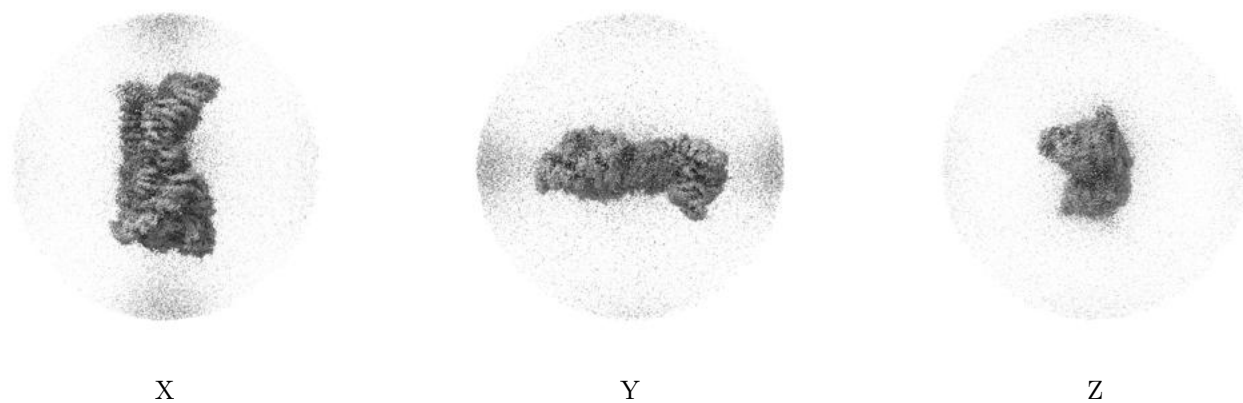
6.5 Orthogonal surface views [i](#)

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.

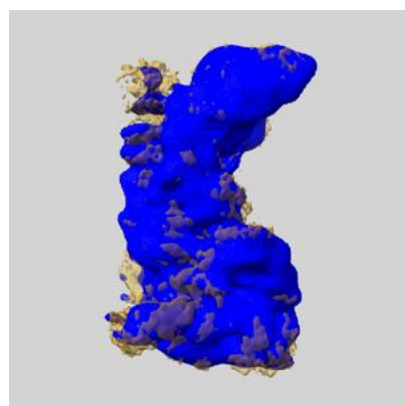
6.6 Mask visualisation [i](#)

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

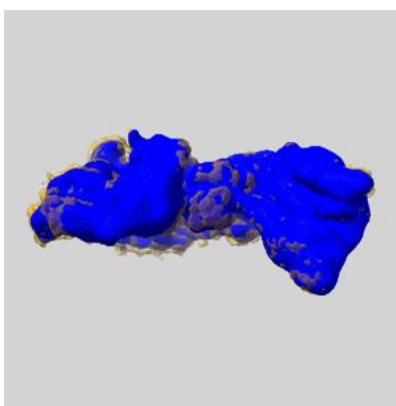
A mask typically either:

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

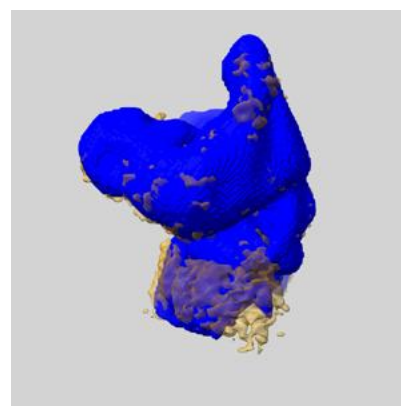
6.6.1 emd_52570_msk_1.map [i](#)



X



Y

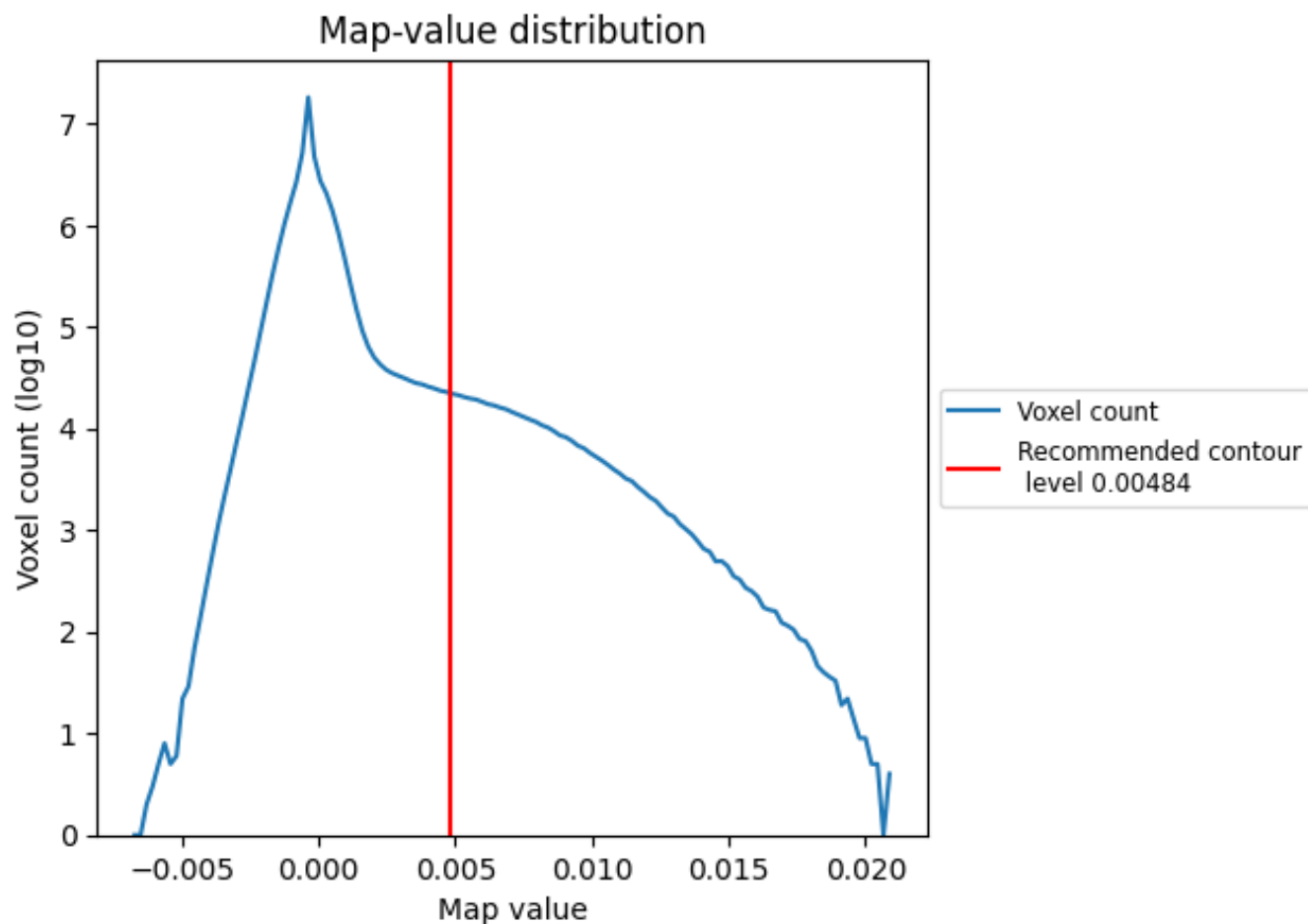


Z

7 Map analysis [i](#)

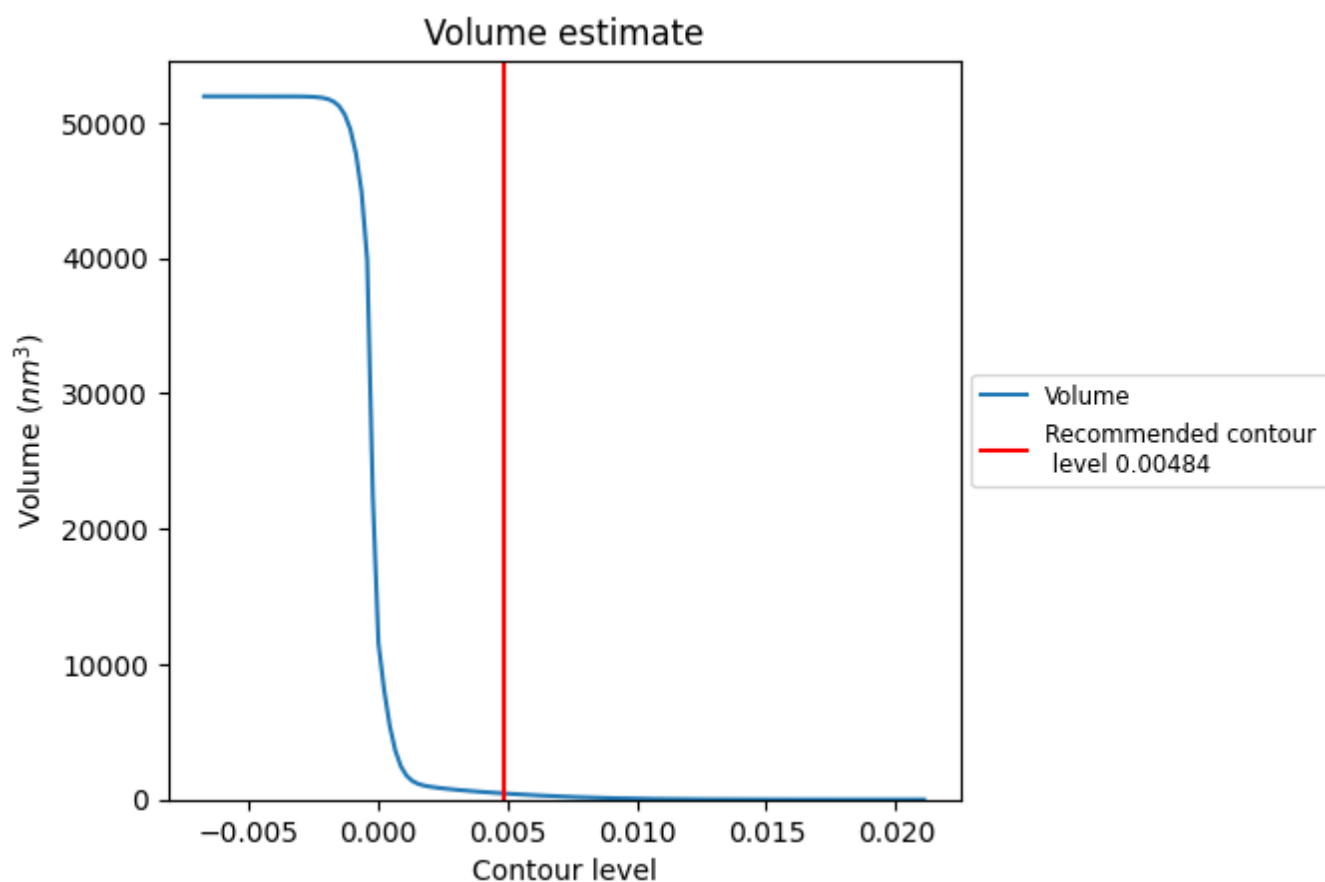
This section contains the results of statistical analysis of the map.

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.

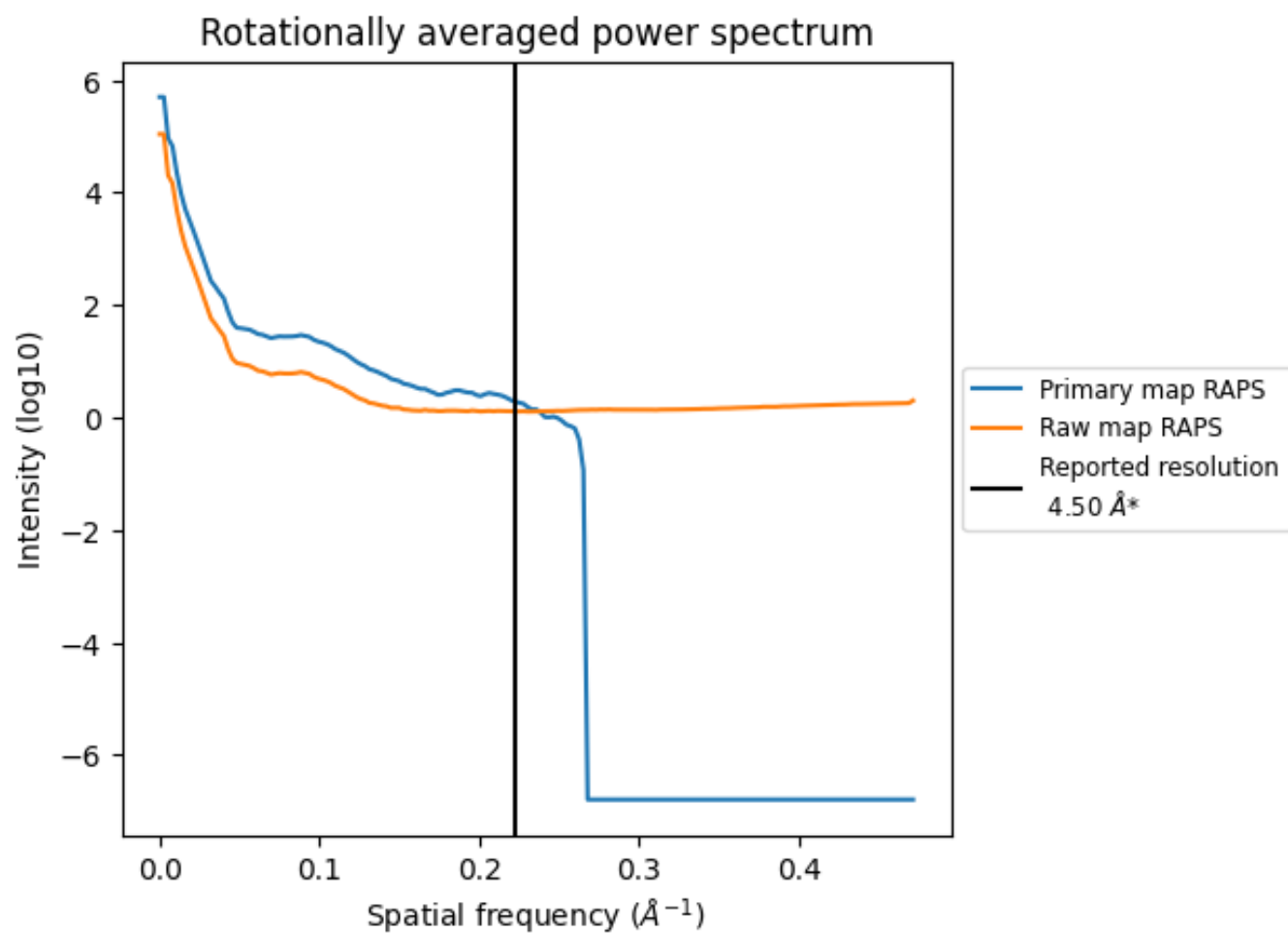
7.2 Volume estimate [i](#)



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 ⓘ

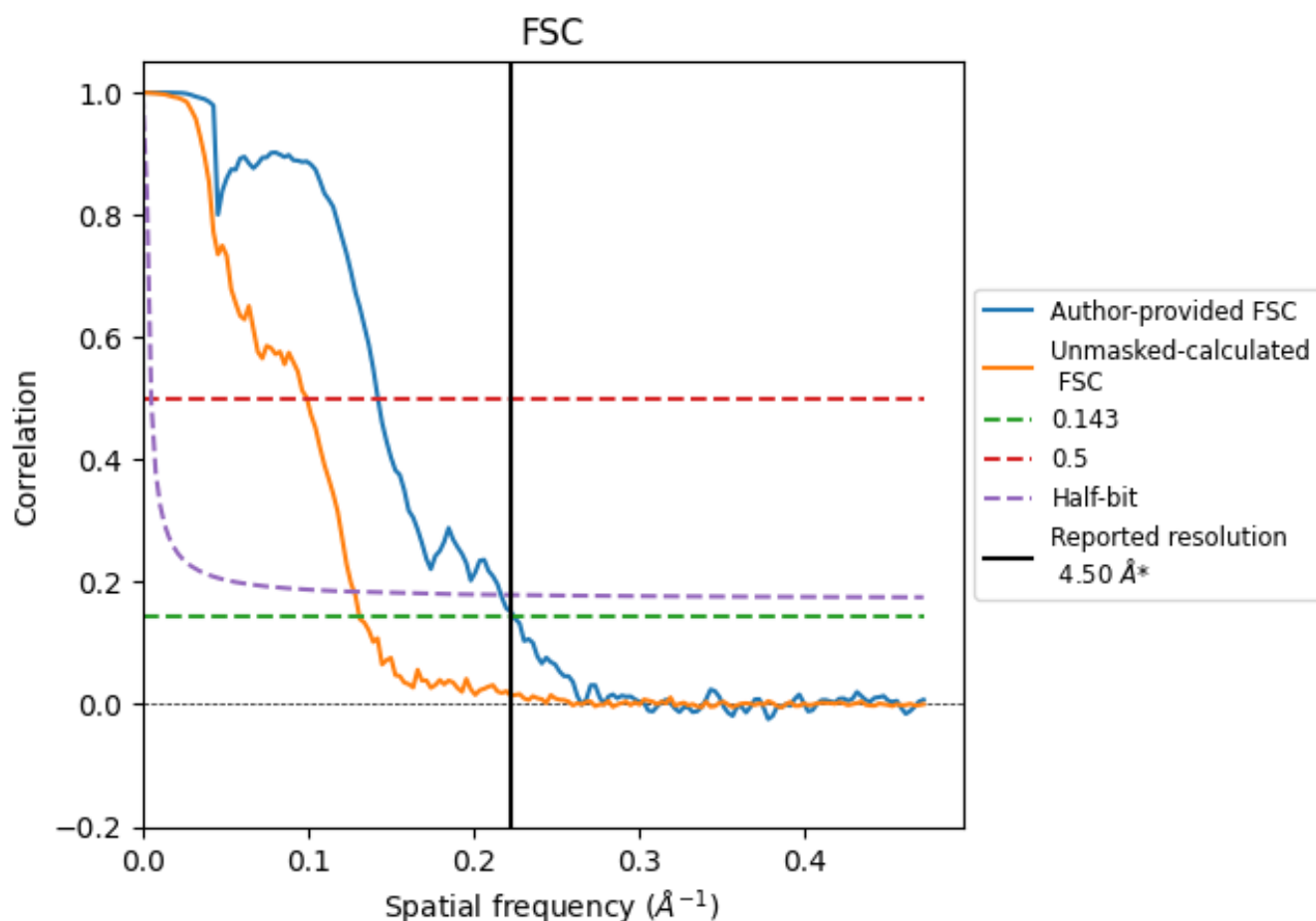


*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.222 \AA^{-1}

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](#)

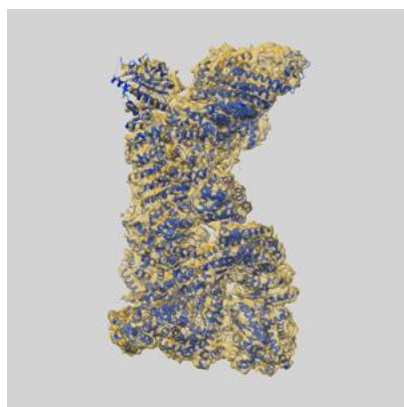
Resolution estimate (Å)	Estimation criterion (FSC cut-off)		
	0.143	0.5	Half-bit
Reported by author	4.50	-	-
Author-provided FSC curve	4.46	7.03	4.62
Unmasked-calculated*	7.63	10.07	7.82

*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 %

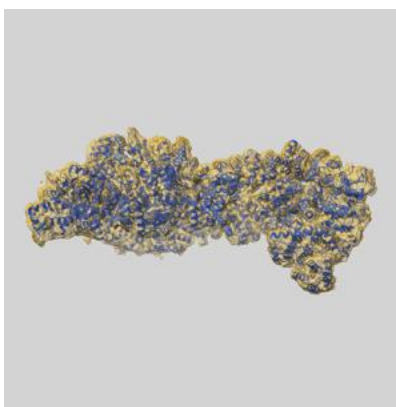
9 Map-model fit [i](#)

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](#).

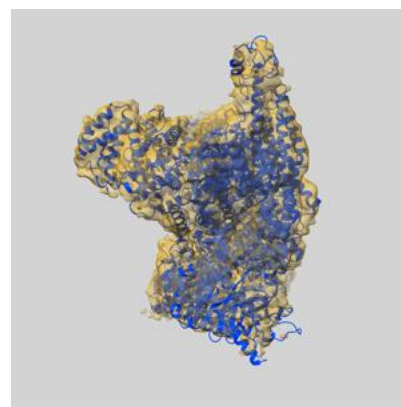
9.1 Map-model overlay [i](#)



X



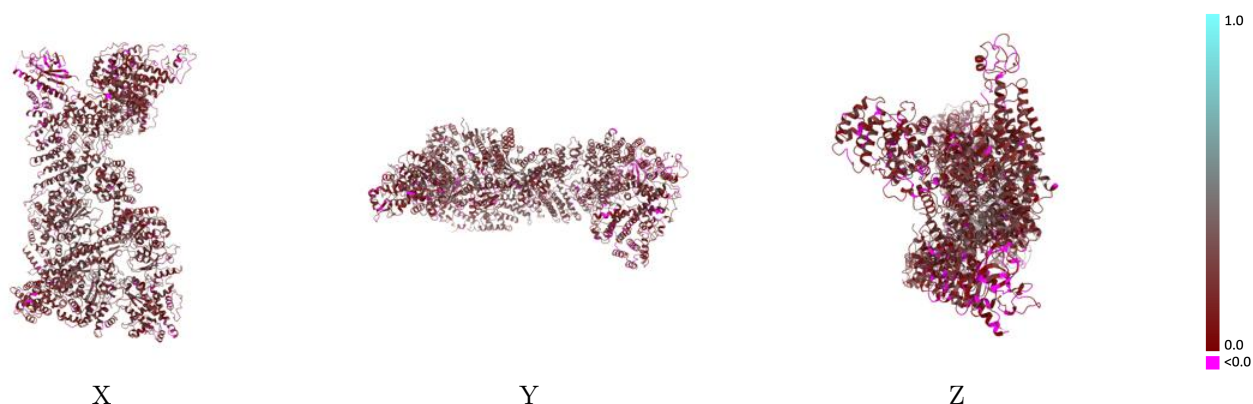
Y



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](#)

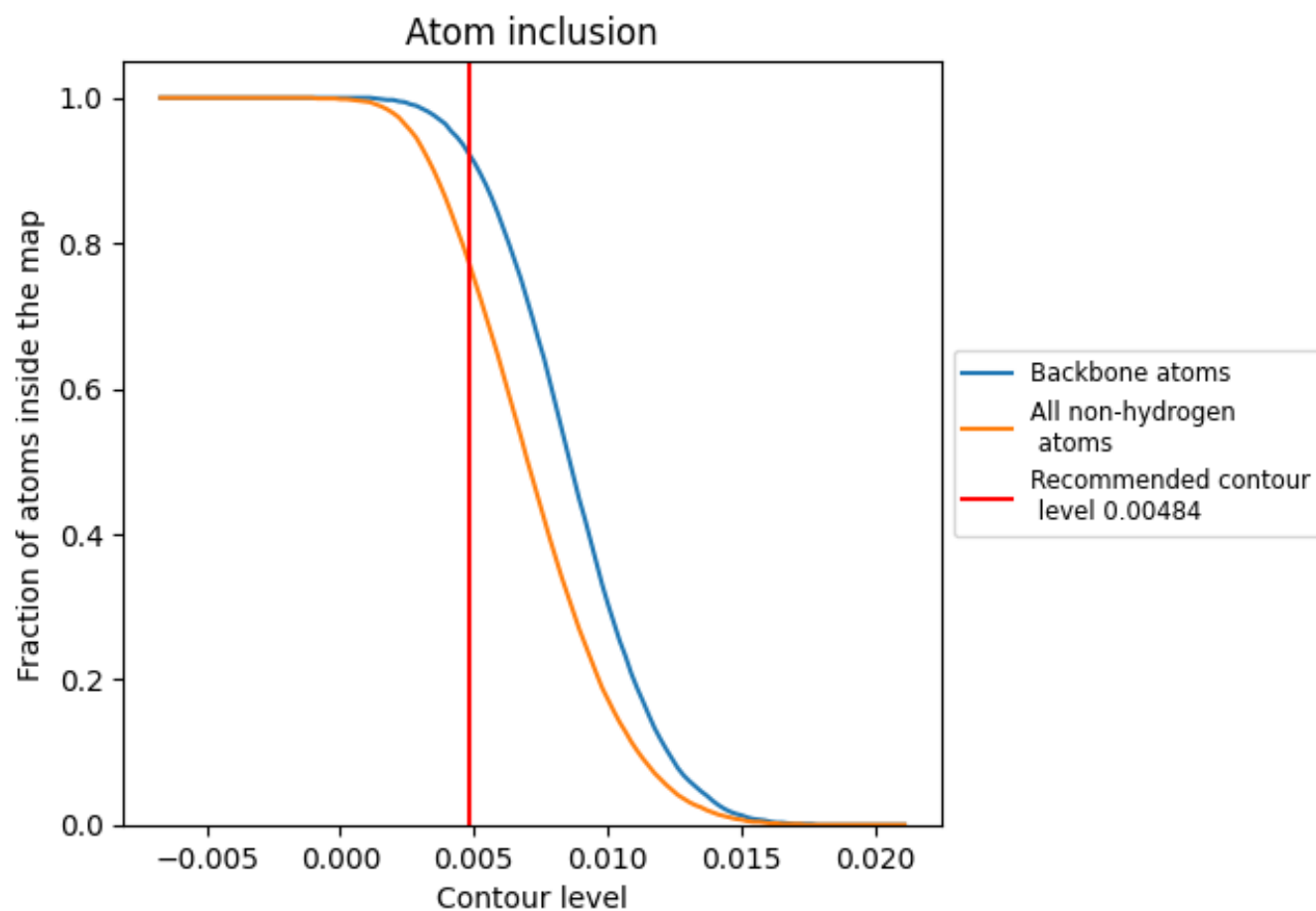


The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

This section was not generated.

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

