



## Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 5, 2026 – 09:49 PM UTC

PDB ID : 5NP1 / pdb\_00005np1  
EMDB ID : EMD-3672  
Title : Open protomer of human ATM (Ataxia telangiectasia mutated)  
Authors : Baretic, D.; Pollard, H.K.; Fisher, D.I.; Johnson, C.M.; Santhanam, B.; Truman, C.M.; Kouba, T.; Fersht, A.R.; Phillips, C.; Williams, R.L.  
Deposited on : 2017-04-13  
Resolution : 5.70 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](mailto:validation@mail.wwpdb.org)

A user guide is available at

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

The types of validation reports are described at

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

---

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

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev132  
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0  
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)  
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)  
MapQ : 1.9.13  
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)  
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)  
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

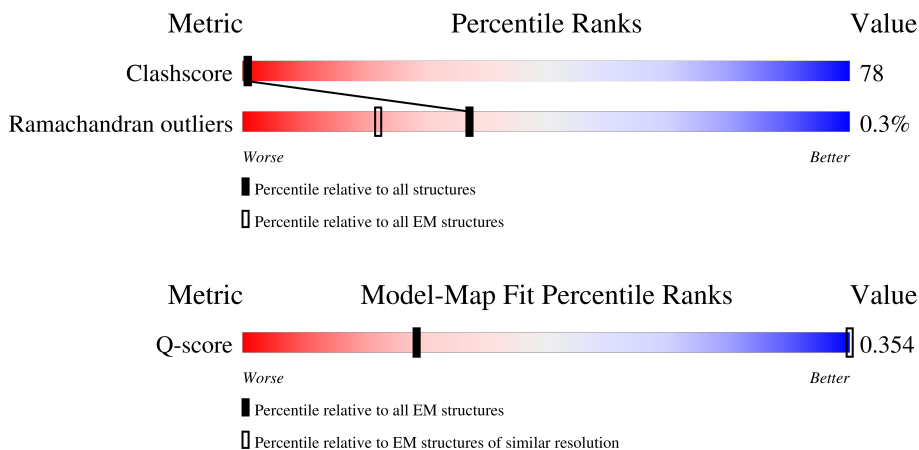
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*ELECTRON MICROSCOPY*

The reported resolution of this entry is 5.70 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<br>(#Entries) | EM structures<br>(#Entries) | Similar EM resolution<br>(#Entries, resolution range(Å)) |
|-----------------------|-----------------------------|-----------------------------|----------------------------------------------------------|
| Clashscore            | 229148                      | 23984                       | -                                                        |
| Ramachandran outliers | 224038                      | 23583                       | -                                                        |
| Q-score               | -                           | 25397                       | 503 ( 5.20 - 6.20 )                                      |

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  $\geq 3$ , 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     | 3066   |                  |

## 2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 12201 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 Serine-protein kinase ATM.

| Mol | Chain | Residues | Atoms |      |      |      | AltConf | Trace |
|-----|-------|----------|-------|------|------|------|---------|-------|
| 1   | A     | 2460     | Total | C    | N    | O    | 0       | 0     |
|     |       |          | 12201 | 7281 | 2460 | 2460 |         |       |

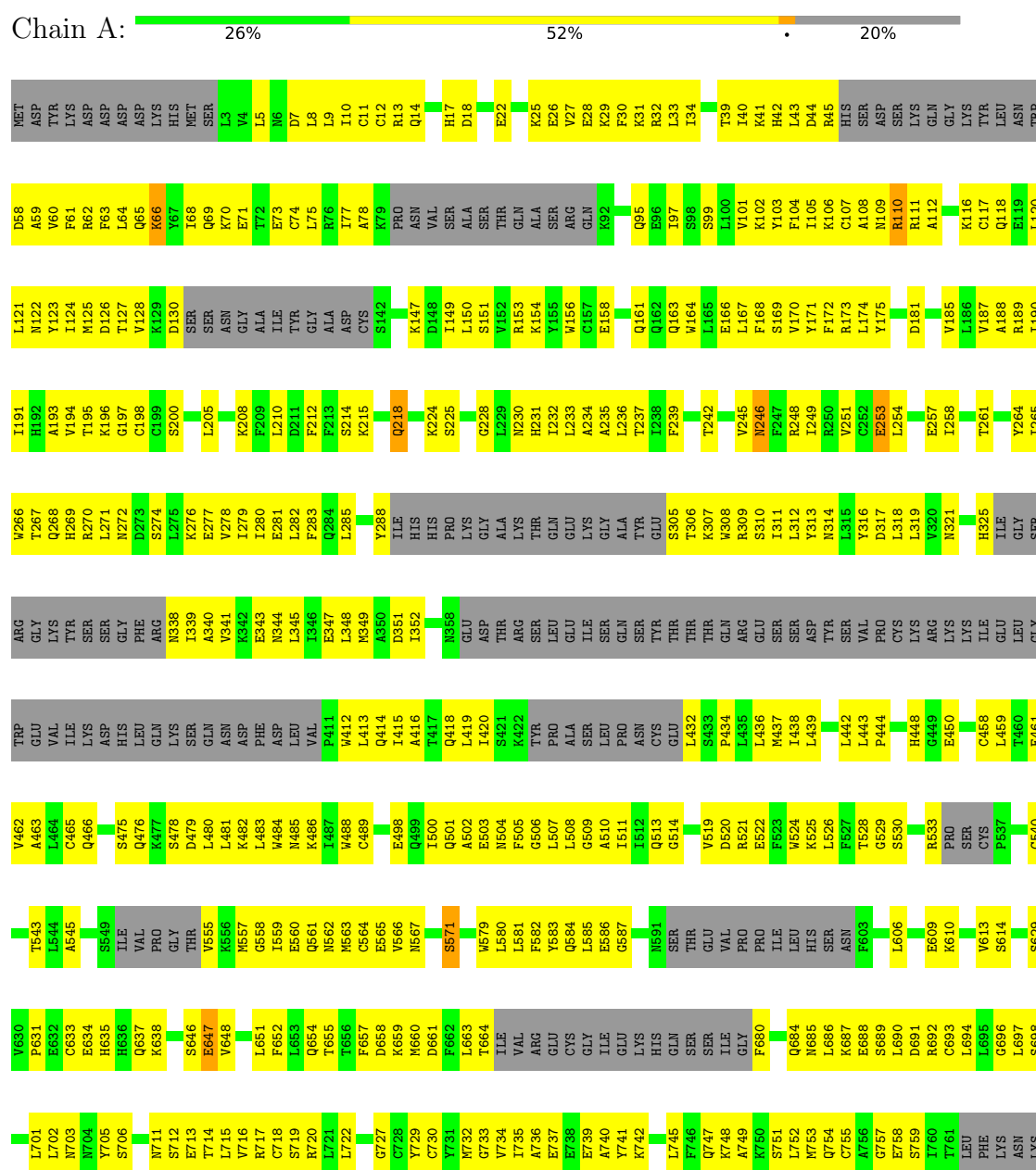
There are 10 discrepancies between the modelled and reference sequences:

| Chain | Residue | Modelled | Actual | Comment               | Reference  |
|-------|---------|----------|--------|-----------------------|------------|
| A     | -9      | MET      | -      | initiating methionine | UNP Q13315 |
| A     | -8      | ASP      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | -7      | TYR      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | -6      | LYS      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | -5      | ASP      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | -4      | ASP      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | -3      | ASP      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | -2      | ASP      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | -1      | LYS      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |
| A     | 0       | HIS      | -      | expression tag        | UNP Q13315 |

### 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: Serine-protein kinase ATM



|       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |      |     |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|-----|
| I1686 | D1604 | R1479 | Y1415 | L1347 | S1281 | V1218 | K1151 | M1087 | F1018 | L954  | GLN  | THR |
| A1605 | A1605 | P1480 | Y1416 | E1353 | L1282 | L1219 | S1152 | E1091 | L1019 | E957  | ASP  | ASN |
| P1607 | P1607 | C1481 | K1416 | E1354 | L1283 | E1220 | V1153 | SER   | LEU   | E958  | GLU  | GLU |
| L1608 | L1608 | S1482 | K1417 | L1355 | L1284 | V1221 | L1154 | ILE   | LEU   | E959  | PHE  | PHE |
| S1695 | T1609 | M1483 | L1418 | A1355 | D1285 | L1222 | L1155 | ARG   | LEU   | P960  | ASP  | ARG |
| R1610 | R1610 | M1484 | L1419 | N1356 | P1288 | ASN   | T1156 | LEU   | TRP   | L961  | ASP  | ILE |
| L1611 | L1611 | D1485 | L1420 | S1357 | P1288 | LEU   | L1157 | GLN   | HIS   | P962  | MET  | GLY |
| L1612 | L1612 | V1486 | A1421 | S1358 | P1288 | GLN   | L1158 | ASP   | LEU   | L963  | LEU  | SER |
| F1703 | D1548 | S1487 | A1422 | S1359 | L1291 | THR   | V1161 | GLY   | THR   | E964  | ARG  | ARG |
| E1704 | N1549 | L1488 | C1423 | L1360 | L1292 | GLU   | S1165 | ASP   | GLU   | D965  | PHE  | ASN |
| D1705 | K1550 | R1489 | E1424 | S1360 | N1293 | TVR   | P1166 | THR   | ARG   | V966  | CYS  | MET |
| K1615 | D1551 | S1490 | K1425 | Q1361 | H1294 | ASN   | L1167 | GLY   | ARG   | L967  | LEU  | GLN |
| E1707 | E1552 | F1491 | A1426 | S1362 | L1295 | LEU   | C1168 | ASP   | LEU   | E968  | VAL  | LEU |
| L1708 | E1553 | S1492 | A1427 | S1362 | L1296 | SER   | E1169 | ASP   | LEU   | L969  | CYS  | MET |
| F1712 | N1554 | L1493 | E1428 | L1365 | P1296 | THR   | K1170 | ASP   | LEU   | L970  | VAL  | LEU |
| R1618 | L1555 | C1494 | T1429 | C1366 | F1298 | PHE   | L1173 | THR   | VAL   | E971  | THR  | CYS |
| R1619 | L1556 | C1495 | N1430 | D1367 | A1299 | PRO   | F1174 | ALA   | ALA   | S972  | THR  | THR |
| M1713 | L1557 | F1496 | N1431 | F1368 | T1303 | L1237 | L1177 | L1108 | C1045 | S974  | GLN  | CYS |
| M1714 | L1557 | F1496 | N1430 | F1368 | R1304 | L1238 | L1177 | L1109 | C1046 | N975  | THR  | LEU |
| L1715 | L1558 | L1497 | V1432 | S1369 | D1305 | N1239 | L1111 | A1110 | L1046 | V976  | ASN  | SER |
| T1716 | L1559 | L1498 | V1433 | S1369 | S1306 | N1240 | SER   | P1112 | K1047 | C977  | ASN  | ASN |
| Y1717 | K1560 | S1499 | K1434 | F1370 | G1307 | Y1241 | VAL   | L1113 | VAL   | S978  | VAL  | CYS |
| L1718 | L1561 | CYS   | R1437 | A1375 | M1308 | T1242 | L1113 | L1114 | L1049 | L979  | SER  | THR |
| M1719 | L1562 | GLN   | E1438 | P1376 | Q1311 | N1243 | L1114 | L1115 | L1050 | Y980  | PHE  | LYS |
| M1720 | D1563 | THR   | L1439 | M1377 | ARG   | L1244 | L1115 | L1116 | D1053 | R981  | ARG  | LYS |
| T1721 | P1564 | ALA   | K1440 | P1378 | GLU   | E1245 | ASN   | L1116 | P1054 | R982  | SER  | SER |
| L1722 | S1635 | VAL   | L1441 | F1379 | GLY   | T1246 | GLY   | L1117 | D921  | ASP   | PRO  | ASN |
| S1636 | L1632 | THR   | Y1442 | H1380 | THR   | F1247 | LEU   | T1118 | D922  | GLN   | ASN  | ASN |
| R1633 | D1637 | TVR   | H1443 | F1381 | ALA   | CYS   | GLU   | A1119 | R923  | ASP   | LYS  | LYS |
| A1634 | Q1627 | LYS   | L1444 | P1382 | THR   | S1280 | PRO   | F1120 | R924  | SER   | ILE  | ILE |
| D1630 | I1631 | ASP   | F1445 | S1383 | LYS   | C1281 | HIS   | E1121 | R925  | SER   | ALA  | ALA |
| I1631 | L1643 | L1512 | V1446 | H1384 | VAL   | L1252 | L1190 | M1122 | K926  | VAL   | SER  | GLY |
| M1644 | M1644 | L1513 | L1447 | V1385 | TVR   | T1253 | LEU   | A1123 | L927  | SER   | GLY  | GLY |
| K1645 | V1645 | E1514 | L1448 | L1386 | LYS   | V1254 | V1190 | L1124 | I1060 | L928  | ASP  | PHE |
| V1647 | V1647 | N1515 | L1449 | K1387 | ASP   | L1255 | K1191 | Y1125 | I1061 | M929  | ALA  | PHE |
| L1648 | L1648 | A1388 | D1452 | A1388 | MET   | L1256 | L1194 | L1125 | L1061 | N992  | ALA  | PHE |
| A1658 | A1658 | T1389 | I1453 | T1389 | LEU   | L1257 | L1194 | L1125 | L1061 | H993  | ASN  | LEU |
| I1659 | I1659 | F1390 | G1456 | F1390 | LYS   | P1257 | V1197 | A1127 | G1065 | V994  | GLY  | ARG |
| N1660 | N1660 | A1391 | L1457 | A1391 | SER   | H1258 | E1199 | M1131 | G1066 | L995  | GLY  | ARG |
| H1661 | H1661 | Y1392 | L1457 | Y1392 | GLU   | L1259 | E1198 | R1132 | D1067 | H996  | THR  | THR |
| L1741 | L1662 | I1393 | G1458 | I1393 | ASN   | V1260 | S1198 | R1132 | F1068 | V997  | LEU  | LEU |
| T1743 | T1662 | S1394 | G1459 | S1394 | LEU   | L1261 | T1201 | E1133 | P1069 | V998  | THR  | LYS |
| K1744 | K1663 | N1395 | A1460 | N1395 | GLY   | R1262 | G1202 | M1134 | V1070 | K999  | LEU  | LYS |
| T1745 | E1664 | H1397 | W1461 | C1396 | LYS   | S1263 | TYR   | S1135 | M1071 | N1000 | GLU  | LEU |
| G1746 | K1665 | L1527 | F1463 | L1398 | GLN   | H1264 | ARG   | H1136 | E1072 | L1001 | PRO  | MET |
| H1747 | V1667 | Y1529 | V1464 | T1399 | ILE   | D1265 | LEU   | A1137 | V1073 | G1002 | THR  | ASN |
| S1748 | L1668 | E1530 | L1465 | L1400 | ASP   | E1267 | GLY   | E1139 | F1074 | Q1003 | LYS  | ASP |
| F1749 | E1669 | Q1531 | R1466 | LEU   | H1334 | V1268 | ASP   | M1140 | T1075 | S1004 | SER  | ILE |
| W1750 | N1595 | LYS   | D1467 | LYS   | L1335 | K1269 | GLY   | P1141 | Q1076 | D1007 | LEU  | ALA |
| E1751 | H1596 | SER   | D1467 | LYS   | L1335 | S1270 | PHE   | E1142 | F1077 | H943  | ASP  | ASP |
| L1752 | F1597 | E1532 | I1468 | ILE   | F1336 | T1271 | M1210 | E1142 | L1078 | D1007 | ILE  | ILE |
| I1752 | L1598 | V1534 | I1469 | LEU   | I1337 | ALA   | A1211 | T1143 | A1079 | M946  | CYS  | CYS |
| Y1753 | S1599 | GLU   | T1471 | GLU   | S1338 | ASN   | S1212 | D1145 | D1080 | L885  | LYS  | LYS |
| K1754 | G1679 | ILE   | L1472 | ILE   | M1339 | ILE   | L1214 | E1146 | L948  | E887  | SER  | SER |
| M1755 | P1680 | K1536 | L1473 | L1408 | Q1276 | Q1276 | D1215 | T1147 | H1083 | L950  | LEU  | LEU |
| T1756 | I1681 | S1409 | I1473 | S1409 | E1277 | E1277 | Y1216 | M1148 | Q1084 | L889  | SER  | ASN |
| L1757 | L1682 | L1539 | Q1478 | S1411 | E1342 | D1278 | L1217 | Y1149 | V1085 | L951  | SER  | ASN |
|       |       |       |       | P1412 | I1343 |       |       |       |       | K827  | K828 |     |

|       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| G2709 | C2624 | L2557 | R2486 | K2363 | A2301 | P2222 | V2155 | CYS   | E1971 | S1905 | T1835 | D1758 |
| G2710 | D2625 | F2568 | L2487 | A2364 | K2302 | T2223 | E2156 | PRO   | K1972 | Q1906 | D1836 | P1759 |
| R2711 | A2626 | T2559 | E2365 | V2366 | E2304 | M2224 | E2157 | E2094 | R1973 | R1907 | V1841 | A1762 |
| R2712 | T2627 | I2560 | E2366 | E2366 | E2304 | A2225 | E2158 | L2095 | S1974 | T1908 | L1842 | Y1763 |
| R2713 | L2628 | L2561 | V2367 | V2367 | Q2306 | L2226 | K2159 | E2096 | T1975 | M1909 | P1843 | Y1764 |
| G2714 | T2629 | A2562 | L2490 | A2368 | S2306 | R2227 | K2160 | E2097 | A1976 | L1910 | Y1844 | Q1765 |
| G2715 | L2630 | L2563 | L2492 | G2369 | L2307 | T2228 |       | L2098 | PHE   | A1911 | Y1844 |       |
| D2720 | A2631 | A2564 | E2493 | G2370 | A2308 | V2229 | V2166 | H2099 | GLU   | Y1912 | L1845 | R1768 |
| D2721 | D2634 | N2565 | M2494 | T2370 | L2309 | L2230 | V2167 | L2230 | GLU   | V1913 | L1846 | T1769 |
| R2723 | A2566 | A2566 | S2495 | ASP   | S2310 | L2231 | S2168 | Q2101 | ALA   | D1914 | H1847 | S1770 |
| G2724 | THR   | F2571 | G2498 | GLY   | L2311 | E2232 | L2169 | A2102 | SER   | Y1915 | L1848 |       |
| D2725 | GLN   | LEU   | S2499 | SER   | L2312 | L2233 | V2170 | A2103 | TRP   | L1849 | L1849 | ARG   |
| A2726 | TRP   | THR   | E2499 | GLU   | L2313 |       | P2171 | A2104 | GLY   | M1916 | L1850 | LYS   |
| M2727 | LYS   | THR   | V2500 | THR   | Q2314 | E2236 | T2172 | R2105 | SER   | R1917 | L1851 | LYS   |
| M2728 | THR   | THR   | G2501 | THR   | M2315 |       | L2173 | M2106 | THR   |       | Q1852 | PHE   |
| Q2729 | VAL   | VAL   | L2502 | L2379 | I2316 | R2244 | L2174 | M2107 | ILE   | K1920 |       | LEU   |
| Q2730 | VAL   | VAL   | M2503 | R2380 | K2317 | E2245 | R2175 | Q2108 | SER   | S1924 | E1856 | GLU   |
| V2731 | VAL   | VAL   | M2504 | N2381 | L2319 | C2246 | L2176 | H2111 | SER   | G1925 | E1857 | VAL   |
| V2732 | ARG   | ARG   | K2505 | G2382 | D2320 | L2247 | Q2177 | C2112 | LEU   | T1926 | W1858 | PRO   |
| F2732 | ARG   | ARG   | R2506 | K2383 |       | K2248 | A2178 |       | SER   | I1927 | R1859 | ARG   |
| Q2733 | ARG   | ARG   | D2507 | K2384 | A2321 | D2249 | I2179 |       | GLU   | F1928 | N1860 | PHE   |
| M2734 | SER   | SER   | G2508 | K2385 | S2322 | L2250 | G2180 |       | LYS   | N1929 | L1861 | ASP   |
| P2647 | LEU   | LEU   |       | A2386 | C2323 | L2251 | E2181 |       | SER   | D1930 | L1862 | ASP   |
| A2649 | GLU   | GLU   |       | F2387 | A2324 | T2252 | L2182 |       | LYS   | A1931 | S1863 | GLU   |
| A2649 | GLU   | GLU   |       | L2388 | ALA   | K2253 | E2183 |       | ASN   | F1932 | T1864 | ASN   |
| D2650 | ASP   | THR   |       | S2389 | ASN   | H2254 | S2184 |       | PRO   | W1933 | H1865 | PRO   |
| L2738 | E2449 | LYS   |       | L2390 | A2328 | L2255 | S2186 |       | PHE   | L1934 | Q1867 | PHE   |
| L2739 | ASN   | ASN   |       | L2391 | P2328 | V2256 | G2186 |       | GLY   | Y1938 | Q1867 | GLY   |
| Q2740 | VAL   | VAL   |       | R2392 |       | E2257 | E2187 |       | THR   | S1939 | F1869 | LEU   |
| P2665 | L2452 | P2518 |       | F2393 | K2331 | L2258 | S2190 |       | S2000 | L1939 | F1870 | ASP   |
|       | L2453 | L2519 |       | R2393 | L2332 | S2259 | H2125 |       | S2001 | G1940 | T1871 | ASP   |
| L2669 | A2454 | A2525 |       | S2394 | T2333 | L2260 | R2191 |       | Q2002 | V1941 | T1872 | ILE   |
|       | L2455 | A2525 |       | L2394 | L2333 | L2261 | SER   |       | D2003 | A1942 | S1872 | ILE   |
| Y2677 | K2456 |       |       | T2396 | Y2334 | R2261 | VAL   |       | L2004 | K1943 | C1873 | ASN   |
| G2678 | E2457 |       |       | Q2397 | T2335 | A2262 | T2129 |       | L2005 | V1944 | L1874 | LEU   |
|       | L2458 |       |       | Y2398 | E2336 | R2263 | T2194 |       | L2006 | A1945 | R1875 | TRP   |
| T2682 | R2458 |       |       | Q2399 | C2337 | T2264 | H2195 |       | E2007 | Q1946 | H1876 | ILE   |
|       | LEU   |       |       | R2400 | L2338 | F2265 | A2131 |       | L2008 |       | F1877 |       |
|       | MET   |       |       | I2401 | R2339 | K2266 | Q2197 |       | Y2009 | A1949 | S1878 |       |
| S2761 | K2460 |       |       | E2402 |       |       | L2198 |       | R2010 | A1950 | Q1879 | A1812 |
| Q2762 | F2462 |       |       | N2403 | C2341 | R2273 | S2199 |       | S2011 | H1951 | T1880 | F1813 |
| S2685 | L2463 |       |       | Y2404 | G2342 | A2274 | E2200 |       | L2012 | F1952 | S1881 | L1814 |
| R2763 | L2464 |       |       | M2405 | N2343 | L2275 | V2201 |       | G2013 | T1953 | R1882 | D1815 |
| S2764 | K2465 |       |       | K2406 | L2344 | T2276 | I2202 |       | E2014 | A1954 | S1883 | S1816 |
| G2765 | K2466 |       |       | S2407 | W2345 | Q2277 | I2203 |       | P2015 | L1955 | T1884 | G1817 |
| E2689 | V2467 |       |       | S2408 | A2346 | L2278 | K2204 |       | D2016 | L1956 | T1885 | G1818 |
|       | E2468 |       |       | E2409 | E2347 | K2279 | W2205 |       | S2017 | Y1957 | P1886 |       |
| L2692 | N2469 |       |       | F2410 | T2348 | Q2280 | Q2206 |       | L2018 | A1958 | A1887 |       |
| A2693 | L2470 |       |       | E2411 | C2349 | Y2281 | K2207 |       | Y2019 | E1959 | M1888 |       |
| G2694 | I2471 |       |       | N2412 |       | N2282 | H2208 |       | G2020 | T1960 | L1889 |       |
|       | N2472 |       |       | K2413 | N2352 | S2283 | S2209 |       | C2021 | Y1961 | D1890 |       |
| R2611 | C2473 |       |       | GLN   | P2353 | V2284 | Q2210 |       | G2022 | A1962 | S1891 |       |
| R2612 | L2474 |       |       | ALA   | A2354 | L2293 | L2211 |       | G2023 | D1963 | E1892 |       |
|       | L2475 |       |       | LEU   | V2355 | E2294 | L2212 |       | GLY   | K1964 | S1893 |       |
| S2476 | S2476 |       |       | LEU   | L2356 | E2294 | K2213 |       | MET   | P1965 | E1894 |       |
|       |       |       |       | LYS   | V2357 | E2295 |       |       | LEU   | S1966 | M1830 |       |
| H2480 | H2480 |       |       | ARG   | Q2358 | A2296 | D2216 |       | ASN   | M1967 | C1831 |       |
| D2618 | D2481 |       |       | ALA   | T2359 | Q2297 | F2217 |       | GLN   | D1968 | L1901 |       |
| C2704 | M2482 |       |       | LYS   | T2360 | V2298 |       |       | PRO   | P1969 | V1832 |       |
| S2619 | W2483 |       |       | GLU   | L2361 | F2299 | Q2220 |       | ILE   | G1903 | K1834 |       |
| V2705 | V2620 |       |       |       |       | W2300 | E2221 |       |       |       |       |       |
| V2706 | E2621 |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| G2706 | S2706 |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| G2786 | G2786 |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |
| A2787 | A2787 |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |       |

|       |       |       |       |
|-------|-------|-------|-------|
| H2788 | S2859 | Q2942 | V3005 |
|       | S2860 | E2943 | A3006 |
| D2795 | I2861 | T2944 | E3007 |
| F2796 | V2862 | L2945 | R3008 |
| S2797 | G2863 | L2946 | V3009 |
| A2798 |       | T2947 | L3010 |
| F2799 | L2866 | I2948 | M3011 |
| Q2800 | G2867 | V2948 | R3012 |
| C2801 |       | E2950 | L3013 |
| Q2802 | H2872 | V2951 | Q3014 |
| K2803 | V2873 | L2952 | E3015 |
|       | Q2874 | L2953 | K3016 |
| M2806 | N2875 | L3017 | L3017 |
| GLU   | I2876 | P2956 | K3018 |
| VAL   | L2877 | L2957 | G3019 |
| GLN   | I2878 | F2958 | V3020 |
| LYS   | N2879 | D2959 |       |
| LYS   | E2880 | N2960 | T3024 |
| SER   |       | T2961 | V3025 |
| F2813 | A2883 | N2962 | L3026 |
| E2814 | E2884 | N2963 | S3027 |
| E2815 | L2885 |       | V3028 |
| K2816 | V2886 | A2967 | G3029 |
|       |       | L2968 | G3030 |
| E2817 |       | V2969 | Q3031 |
| V2818 | A2893 | L2970 | V3032 |
| V2819 | F2894 |       | N3033 |
| F2820 | E2895 | GLN   | L3034 |
| M2821 | Q2896 | GLN   | L3035 |
| D2822 |       | ARG   | I3036 |
| V2823 |       | PRO   | I3037 |
| C2824 | I2899 | GLU   | Q3038 |
| Q2825 |       | ASP   | A3039 |
| N2826 | L2910 | GLU   | I3040 |
| F2827 | T2911 | THR   | D3041 |
|       | R2912 | LEU   | P3042 |
|       | D2913 | GLU   | K3043 |
|       | I2914 | HIS   |       |
| V2833 | V2915 | PRO   |       |
| F2834 | D2916 | THR   |       |
| C2835 | Q2917 | LEU   | S3046 |
|       |       | ASN   | R3047 |
| F2839 | T2921 | ALA   | L3048 |
| L2840 | G2922 | ASP   | F3049 |
| D2841 | V2923 | ASP   |       |
| P2842 | E2924 | ASP   | M3052 |
| A2843 | G2925 | GLN   | K3053 |
| I2844 | V2926 | GLU   | A3054 |
|       | F2927 | CYS   | M3055 |
| W2845 | R2928 | LYS   | V3056 |
| F2846 | R2929 | ARG   |       |
| E2847 | C2930 | ASN   |       |
| K2848 | C2931 | LEU   |       |
| R2849 | E2932 | SER   |       |
| L2850 | K2933 | ASP   |       |
| A2851 | T2934 | I2998 |       |
| T2852 | M2935 | D2999 |       |
| T2853 | R2936 | Q3000 |       |
| R2854 | E2937 | S3001 |       |
| S2855 |       | F3002 |       |
| V2856 | N2940 | N3003 |       |
| A2857 | S2941 | K3004 |       |
| T2858 |       |       |       |

## 4 Experimental information

| Property                             | Value                           | Source    |
|--------------------------------------|---------------------------------|-----------|
| EM reconstruction method             | SINGLE PARTICLE                 | Depositor |
| Imposed symmetry                     | POINT, C1                       | Depositor |
| Number of particles used             | 60556                           | Depositor |
| Resolution determination method      | FSC 0.143 CUT-OFF               | Depositor |
| CTF correction method                | PHASE FLIPPING ONLY             | Depositor |
| Microscope                           | FEI TITAN KRIOS                 | Depositor |
| Voltage (kV)                         | 300                             | Depositor |
| Electron dose ( $e^-/\text{\AA}^2$ ) | 2.1                             | Depositor |
| Minimum defocus (nm)                 | 2500                            | Depositor |
| Maximum defocus (nm)                 | 4000                            | Depositor |
| Magnification                        | 35714                           | Depositor |
| Image detector                       | GATAN K2 SUMMIT (4k x 4k)       | Depositor |
| Maximum map value                    | 0.137                           | Depositor |
| Minimum map value                    | -0.043                          | Depositor |
| Average map value                    | -0.000                          | Depositor |
| Map value standard deviation         | 0.004                           | Depositor |
| Recommended contour level            | 0.026                           | Depositor |
| Map size ( $\text{\AA}$ )            | 428.99997, 428.99997, 428.99997 | wwPDB     |
| Map dimensions                       | 300, 300, 300                   | wwPDB     |
| Map angles ( $^\circ$ )              | 90.0, 90.0, 90.0                | wwPDB     |
| Pixel spacing ( $\text{\AA}$ )       | 1.43, 1.43, 1.43                | Depositor |

## 5 Model quality

### 5.1 Standard geometry

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

| Mol | Chain | Bond lengths |                | Bond angles |                 |
|-----|-------|--------------|----------------|-------------|-----------------|
|     |       | RMSZ         | $\# Z  > 5$    | RMSZ        | $\# Z  > 5$     |
| 1   | A     | 0.80         | 5/12155 (0.0%) | 1.12        | 48/16884 (0.3%) |

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                   | 78                  |

All (5) bond length outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res  | Type | Atoms | Z      | Observed(Å) | Ideal(Å) |
|-----|-------|------|------|-------|--------|-------------|----------|
| 1   | A     | 218  | GLN  | CA-C  | -10.23 | 1.38        | 1.52     |
| 1   | A     | 647  | GLU  | CA-C  | -9.65  | 1.38        | 1.52     |
| 1   | A     | 947  | TYR  | CA-C  | -7.04  | 1.42        | 1.52     |
| 1   | A     | 2961 | THR  | CA-C  | -6.56  | 1.43        | 1.52     |
| 1   | A     | 1111 | LEU  | C-N   | -6.35  | 1.25        | 1.34     |

All (48) bond angle outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res  | Type | Atoms  | Z      | Observed(°) | Ideal(°) |
|-----|-------|------|------|--------|--------|-------------|----------|
| 1   | A     | 1375 | ALA  | CA-C-N | 21.70  | 141.08      | 119.82   |
| 1   | A     | 1375 | ALA  | C-N-CA | 21.70  | 141.08      | 119.82   |
| 1   | A     | 1410 | LYS  | CA-C-N | -12.14 | 109.29      | 122.89   |
| 1   | A     | 1410 | LYS  | C-N-CA | -12.14 | 109.29      | 122.89   |
| 1   | A     | 1053 | ASP  | CA-C-N | -11.10 | 107.84      | 119.83   |
| 1   | A     | 1053 | ASP  | C-N-CA | -11.10 | 107.84      | 119.83   |
| 1   | A     | 2765 | GLY  | N-CA-C | 11.00  | 130.04      | 114.64   |
| 1   | A     | 1924 | SER  | CA-C-N | -10.21 | 111.80      | 120.98   |
| 1   | A     | 1924 | SER  | C-N-CA | -10.21 | 111.80      | 120.98   |
| 1   | A     | 1726 | CYS  | CA-C-N | -10.10 | 109.70      | 122.43   |
| 1   | A     | 1726 | CYS  | C-N-CA | -10.10 | 109.70      | 122.43   |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res  | Type | Atoms  | Z     | Observed(°) | Ideal(°) |
|-----|-------|------|------|--------|-------|-------------|----------|
| 1   | A     | 1758 | ASP  | CA-C-N | 9.35  | 129.93      | 119.83   |
| 1   | A     | 1758 | ASP  | C-N-CA | 9.35  | 129.93      | 119.83   |
| 1   | A     | 1925 | GLY  | N-CA-C | -9.09 | 96.80       | 110.97   |
| 1   | A     | 1758 | ASP  | N-CA-C | 8.34  | 123.52      | 112.35   |
| 1   | A     | 2617 | VAL  | N-CA-C | -7.87 | 103.14      | 112.98   |
| 1   | A     | 1353 | GLU  | CA-C-N | 7.47  | 129.18      | 119.84   |
| 1   | A     | 1353 | GLU  | C-N-CA | 7.47  | 129.18      | 119.84   |
| 1   | A     | 1148 | TYR  | N-CA-C | -7.38 | 104.27      | 113.20   |
| 1   | A     | 1054 | PRO  | N-CA-C | -7.04 | 100.19      | 111.03   |
| 1   | A     | 1067 | ASP  | CA-C-N | -6.88 | 114.95      | 122.59   |
| 1   | A     | 1067 | ASP  | C-N-CA | -6.88 | 114.95      | 122.59   |
| 1   | A     | 1564 | PRO  | CA-C-N | -6.72 | 110.38      | 122.28   |
| 1   | A     | 1564 | PRO  | C-N-CA | -6.72 | 110.38      | 122.28   |
| 1   | A     | 2803 | LYS  | N-CA-C | -6.41 | 105.33      | 113.02   |
| 1   | A     | 966  | VAL  | N-CA-C | -6.39 | 104.99      | 112.98   |
| 1   | A     | 1828 | LYS  | N-CA-C | -6.39 | 104.09      | 113.16   |
| 1   | A     | 1376 | PRO  | N-CA-C | -6.34 | 105.80      | 113.98   |
| 1   | A     | 1481 | SER  | CA-C-N | -6.25 | 109.60      | 121.54   |
| 1   | A     | 1481 | SER  | C-N-CA | -6.25 | 109.60      | 121.54   |
| 1   | A     | 2878 | ILE  | CA-C-N | -6.10 | 114.31      | 122.42   |
| 1   | A     | 2878 | ILE  | C-N-CA | -6.10 | 114.31      | 122.42   |
| 1   | A     | 2298 | VAL  | N-CA-C | -5.97 | 105.51      | 112.98   |
| 1   | A     | 1297 | TYR  | N-CA-C | -5.97 | 105.71      | 112.87   |
| 1   | A     | 1113 | LEU  | CA-C-N | -5.90 | 112.60      | 120.63   |
| 1   | A     | 1113 | LEU  | C-N-CA | -5.90 | 112.60      | 120.63   |
| 1   | A     | 2302 | LYS  | N-CA-C | -5.87 | 100.27      | 109.25   |
| 1   | A     | 1759 | PRO  | N-CA-C | 5.86  | 120.06      | 111.03   |
| 1   | A     | 2959 | ASP  | N-CA-C | -5.86 | 104.24      | 111.33   |
| 1   | A     | 1411 | SER  | N-CA-C | -5.70 | 100.67      | 109.79   |
| 1   | A     | 571  | SER  | N-CA-C | 5.44  | 118.38      | 111.69   |
| 1   | A     | 246  | ASN  | CA-C-N | -5.33 | 111.29      | 121.94   |
| 1   | A     | 246  | ASN  | C-N-CA | -5.33 | 111.29      | 121.94   |
| 1   | A     | 2678 | GLY  | N-CA-C | -5.22 | 107.33      | 114.64   |
| 1   | A     | 3016 | LYS  | CA-C-N | -5.12 | 115.61      | 122.42   |
| 1   | A     | 3016 | LYS  | C-N-CA | -5.12 | 115.61      | 122.42   |
| 1   | A     | 2967 | ALA  | N-CA-C | -5.10 | 106.64      | 112.86   |
| 1   | A     | 1391 | ALA  | N-CA-C | 5.04  | 121.17      | 113.51   |

There are no chirality outliers.

All (78) planarity outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res  | Type | Group   |
|-----|-------|------|------|---------|
| 1   | A     | 1012 | ARG  | Peptide |
| 1   | A     | 1013 | ASP  | Peptide |
| 1   | A     | 1054 | PRO  | Peptide |
| 1   | A     | 1066 | LYS  | Peptide |
| 1   | A     | 110  | ARG  | Peptide |
| 1   | A     | 111  | ARG  | Peptide |
| 1   | A     | 1112 | PRO  | Peptide |
| 1   | A     | 1114 | LYS  | Peptide |
| 1   | A     | 1132 | ARG  | Peptide |
| 1   | A     | 1211 | ALA  | Peptide |
| 1   | A     | 1252 | TYR  | Peptide |
| 1   | A     | 1292 | VAL  | Peptide |
| 1   | A     | 1299 | ALA  | Peptide |
| 1   | A     | 1362 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 1376 | PRO  | Peptide |
| 1   | A     | 1388 | ALA  | Peptide |
| 1   | A     | 1389 | THR  | Peptide |
| 1   | A     | 1410 | LYS  | Peptide |
| 1   | A     | 1411 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 1415 | TYR  | Peptide |
| 1   | A     | 1428 | GLU  | Peptide |
| 1   | A     | 1434 | LYS  | Peptide |
| 1   | A     | 1436 | HIS  | Peptide |
| 1   | A     | 1447 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 1481 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 1483 | ILE  | Peptide |
| 1   | A     | 1530 | GLU  | Peptide |
| 1   | A     | 1532 | VAL  | Peptide |
| 1   | A     | 1542 | LEU  | Peptide |
| 1   | A     | 1576 | ILE  | Peptide |
| 1   | A     | 1609 | THR  | Peptide |
| 1   | A     | 1625 | LYS  | Peptide |
| 1   | A     | 1687 | ALA  | Peptide |
| 1   | A     | 1695 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 1727 | VAL  | Peptide |
| 1   | A     | 1728 | LYS  | Peptide |
| 1   | A     | 1748 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 1758 | ASP  | Peptide |
| 1   | A     | 181  | ASP  | Peptide |
| 1   | A     | 1875 | ARG  | Peptide |
| 1   | A     | 1876 | HIS  | Peptide |
| 1   | A     | 1901 | LEU  | Peptide |
| 1   | A     | 1997 | THR  | Peptide |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res  | Type | Group   |
|-----|-------|------|------|---------|
| 1   | A     | 2222 | PRO  | Peptide |
| 1   | A     | 2283 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 2301 | ALA  | Peptide |
| 1   | A     | 2307 | LEU  | Peptide |
| 1   | A     | 2308 | ALA  | Peptide |
| 1   | A     | 248  | ARG  | Peptide |
| 1   | A     | 249  | ILE  | Peptide |
| 1   | A     | 2498 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 253  | GLU  | Peptide |
| 1   | A     | 261  | THR  | Peptide |
| 1   | A     | 2646 | ASN  | Peptide |
| 1   | A     | 2648 | PRO  | Peptide |
| 1   | A     | 2665 | PRO  | Peptide |
| 1   | A     | 2669 | ILE  | Peptide |
| 1   | A     | 2677 | TYR  | Peptide |
| 1   | A     | 2683 | ILE  | Peptide |
| 1   | A     | 272  | ASN  | Peptide |
| 1   | A     | 2766 | VAL  | Peptide |
| 1   | A     | 2818 | GLU  | Peptide |
| 1   | A     | 2833 | TYR  | Peptide |
| 1   | A     | 2862 | VAL  | Peptide |
| 1   | A     | 2875 | ASN  | Peptide |
| 1   | A     | 2921 | THR  | Peptide |
| 1   | A     | 2922 | GLY  | Peptide |
| 1   | A     | 2925 | GLY  | Peptide |
| 1   | A     | 2941 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 2963 | ASN  | Peptide |
| 1   | A     | 3019 | GLY  | Peptide |
| 1   | A     | 3025 | VAL  | Peptide |
| 1   | A     | 3026 | LEU  | Peptide |
| 1   | A     | 3027 | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 571  | SER  | Peptide |
| 1   | A     | 66   | LYS  | Peptide |
| 1   | A     | 836  | GLU  | Peptide |
| 1   | A     | 837  | SER  | Peptide |

## 5.2 Too-close contacts

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

| Mol | Chain | Non-H | H(model) | H(added) | Clashes | Symm-Clashes |
|-----|-------|-------|----------|----------|---------|--------------|
| 1   | A     | 12201 | 0        | 5285     | 1362    | 0            |
| All | All   | 12201 | 0        | 5285     | 1362    | 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 78.

All (1362) 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:1480:PRO:HA | 1:A:1484:MET:H  | 1.16                     | 1.10              |
| 1:A:1606:LEU:O  | 1:A:1608:LEU:N  | 1.88                     | 1.07              |
| 1:A:2714:GLN:HA | 1:A:2768:GLU:HA | 1.40                     | 1.01              |
| 1:A:2388:LEU:O  | 1:A:2392:ARG:N  | 1.94                     | 1.00              |
| 1:A:1712:PHE:O  | 1:A:1715:LEU:N  | 1.96                     | 0.99              |
| 1:A:2391:ALA:O  | 1:A:2395:ASP:N  | 1.95                     | 0.98              |
| 1:A:1239:LEU:O  | 1:A:1243:ASN:N  | 1.97                     | 0.98              |
| 1:A:2461:ARG:O  | 1:A:2465:LYS:N  | 1.97                     | 0.97              |
| 1:A:1750:TRP:O  | 1:A:1754:LYS:N  | 1.96                     | 0.97              |
| 1:A:345:LEU:O   | 1:A:349:MET:N   | 1.96                     | 0.97              |
| 1:A:193:ALA:O   | 1:A:197:GLY:N   | 1.98                     | 0.97              |
| 1:A:2850:LEU:O  | 1:A:2854:ARG:N  | 1.97                     | 0.97              |
| 1:A:1438:ILE:O  | 1:A:1442:TYR:N  | 1.98                     | 0.97              |
| 1:A:3009:VAL:O  | 1:A:3013:LEU:N  | 1.97                     | 0.96              |
| 1:A:2912:ARG:O  | 1:A:2916:ASP:N  | 1.98                     | 0.96              |
| 1:A:2470:TYR:O  | 1:A:2474:LEU:N  | 1.98                     | 0.96              |
| 1:A:1960:ILE:O  | 1:A:1964:LYS:N  | 1.99                     | 0.95              |
| 1:A:2457:GLU:O  | 1:A:2461:ARG:N  | 1.98                     | 0.95              |
| 1:A:1827:LEU:O  | 1:A:1831:CYS:N  | 1.99                     | 0.95              |
| 1:A:2624:CYS:O  | 1:A:2628:ILE:N  | 2.00                     | 0.94              |
| 1:A:2394:SER:O  | 1:A:2398:TYR:N  | 1.99                     | 0.94              |
| 1:A:1495:CYS:O  | 1:A:1499:SER:N  | 1.99                     | 0.94              |
| 1:A:3032:VAL:O  | 1:A:3036:ILE:N  | 1.99                     | 0.94              |
| 1:A:1250:SER:O  | 1:A:1253:LYS:N  | 1.99                     | 0.94              |
| 1:A:2467:VAL:O  | 1:A:2471:ILE:N  | 2.01                     | 0.94              |
| 1:A:581:LEU:O   | 1:A:585:LEU:N   | 2.01                     | 0.94              |
| 1:A:2005:LEU:O  | 1:A:2009:TYR:N  | 2.01                     | 0.93              |
| 1:A:2199:SER:O  | 1:A:2203:ILE:N  | 2.00                     | 0.93              |
| 1:A:2363:LYS:O  | 1:A:2367:VAL:N  | 2.01                     | 0.93              |
| 1:A:2541:LEU:O  | 1:A:2545:ILE:N  | 2.01                     | 0.93              |
| 1:A:2392:ARG:O  | 1:A:2396:THR:N  | 2.01                     | 0.93              |
| 1:A:2309:LEU:O  | 1:A:2313:LYS:N  | 1.99                     | 0.93              |
| 1:A:1531:GLN:O  | 1:A:1534:VAL:N  | 2.02                     | 0.93              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1484:MET:O  | 1:A:1488:LEU:N  | 2.02                     | 0.92              |
| 1:A:122:ASN:O   | 1:A:126:ASP:N   | 2.03                     | 0.92              |
| 1:A:1963:ASP:O  | 1:A:1967:MET:N  | 2.01                     | 0.92              |
| 1:A:2341:CYS:O  | 1:A:2345:LEU:N  | 2.02                     | 0.92              |
| 1:A:2398:TYR:O  | 1:A:2402:GLU:N  | 2.01                     | 0.92              |
| 1:A:2456:LYS:O  | 1:A:2460:LYS:N  | 2.03                     | 0.92              |
| 1:A:2311:ILE:O  | 1:A:2315:MET:N  | 2.02                     | 0.92              |
| 1:A:2606:ILE:O  | 1:A:2610:ARG:N  | 2.01                     | 0.92              |
| 1:A:1151:LYS:O  | 1:A:1155:LEU:N  | 2.02                     | 0.92              |
| 1:A:2395:ASP:O  | 1:A:2399:GLN:N  | 2.02                     | 0.91              |
| 1:A:2354:ALA:O  | 1:A:2358:GLN:N  | 2.02                     | 0.91              |
| 1:A:1492:SER:O  | 1:A:1496:ASP:N  | 2.03                     | 0.91              |
| 1:A:2405:MET:O  | 1:A:2409:GLU:N  | 2.03                     | 0.91              |
| 1:A:2485:PHE:O  | 1:A:2489:SER:N  | 2.02                     | 0.91              |
| 1:A:1115:LEU:O  | 1:A:1119:ALA:N  | 2.04                     | 0.91              |
| 1:A:3000:GLN:O  | 1:A:3004:LYS:N  | 2.03                     | 0.91              |
| 1:A:185:VAL:HA  | 1:A:188:ALA:HB3 | 1.53                     | 0.91              |
| 1:A:1862:LEU:O  | 1:A:1866:VAL:N  | 2.02                     | 0.91              |
| 1:A:2386:ALA:O  | 1:A:2390:LEU:N  | 2.02                     | 0.91              |
| 1:A:2686:PHE:HA | 1:A:2704:CYS:HA | 1.51                     | 0.90              |
| 1:A:2006:LEU:O  | 1:A:2010:ARG:N  | 2.03                     | 0.90              |
| 1:A:2316:ILE:O  | 1:A:2320:ASP:N  | 2.04                     | 0.90              |
| 1:A:2400:ARG:O  | 1:A:2404:TYR:N  | 2.02                     | 0.90              |
| 1:A:2463:LEU:O  | 1:A:2467:VAL:N  | 2.04                     | 0.90              |
| 1:A:1828:LYS:O  | 1:A:1832:GLU:N  | 2.04                     | 0.90              |
| 1:A:2180:GLY:O  | 1:A:2184:SER:N  | 2.04                     | 0.90              |
| 1:A:2312:LEU:O  | 1:A:2316:ILE:N  | 2.05                     | 0.90              |
| 1:A:3007:GLU:O  | 1:A:3011:MET:N  | 2.03                     | 0.90              |
| 1:A:2397:GLN:O  | 1:A:2401:ILE:N  | 2.03                     | 0.90              |
| 1:A:1342:GLU:O  | 1:A:1346:GLU:N  | 2.05                     | 0.90              |
| 1:A:692:ARG:O   | 1:A:696:GLY:N   | 2.04                     | 0.90              |
| 1:A:1998:GLY:O  | 1:A:2002:GLN:N  | 2.05                     | 0.90              |
| 1:A:509:GLY:O   | 1:A:513:GLN:N   | 2.05                     | 0.90              |
| 1:A:923:ILE:O   | 1:A:927:LEU:N   | 2.05                     | 0.90              |
| 1:A:1376:PRO:O  | 1:A:1380:HIS:N  | 2.04                     | 0.90              |
| 1:A:2401:ILE:O  | 1:A:2405:MET:N  | 2.05                     | 0.90              |
| 1:A:2018:LEU:O  | 1:A:2022:GLY:N  | 2.05                     | 0.90              |
| 1:A:3006:ALA:O  | 1:A:3010:LEU:N  | 2.03                     | 0.89              |
| 1:A:647:GLU:O   | 1:A:651:LEU:N   | 2.05                     | 0.89              |
| 1:A:1255:LEU:O  | 1:A:1259:LEU:N  | 2.04                     | 0.89              |
| 1:A:2016:ASP:O  | 1:A:2020:GLY:N  | 2.04                     | 0.89              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2097:GLU:O  | 1:A:2101:GLN:N  | 2.04                     | 0.89              |
| 1:A:2822:ASP:O  | 1:A:2826:ASN:N  | 2.04                     | 0.89              |
| 1:A:2910:LEU:O  | 1:A:2914:ILE:N  | 2.04                     | 0.89              |
| 1:A:3002:PHE:O  | 1:A:3006:ALA:N  | 2.04                     | 0.89              |
| 1:A:2355:VAL:O  | 1:A:2359:THR:N  | 2.04                     | 0.89              |
| 1:A:276:LYS:O   | 1:A:280:ILE:N   | 2.04                     | 0.89              |
| 1:A:1464:VAL:O  | 1:A:1468:VAL:N  | 2.05                     | 0.89              |
| 1:A:2315:MET:O  | 1:A:2319:LEU:N  | 2.05                     | 0.89              |
| 1:A:2000:SER:O  | 1:A:2004:LEU:N  | 2.06                     | 0.89              |
| 1:A:2306:SER:HA | 1:A:2310:SER:H  | 1.37                     | 0.89              |
| 1:A:2625:ASP:O  | 1:A:2629:ILE:N  | 2.06                     | 0.89              |
| 1:A:1823:ILE:O  | 1:A:1827:LEU:N  | 2.05                     | 0.89              |
| 1:A:2849:ARG:O  | 1:A:2853:THR:N  | 2.05                     | 0.89              |
| 1:A:1736:CYS:O  | 1:A:1740:ILE:N  | 2.04                     | 0.88              |
| 1:A:1824:LEU:O  | 1:A:1828:LYS:N  | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:2275:ILE:O  | 1:A:2279:LYS:N  | 2.05                     | 0.88              |
| 1:A:2408:SER:O  | 1:A:2412:ASN:N  | 2.07                     | 0.88              |
| 1:A:2603:ASN:O  | 1:A:2607:CYS:N  | 2.05                     | 0.88              |
| 1:A:1715:LEU:O  | 1:A:1719:ASN:N  | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:736:ALA:O   | 1:A:740:ALA:N   | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:1262:ARG:O  | 1:A:1266:ASP:N  | 2.07                     | 0.88              |
| 1:A:2003:ASP:O  | 1:A:2007:GLU:N  | 2.07                     | 0.88              |
| 1:A:2179:ILE:O  | 1:A:2183:GLU:N  | 2.05                     | 0.88              |
| 1:A:2862:VAL:O  | 1:A:2866:LEU:N  | 2.05                     | 0.88              |
| 1:A:1613:GLY:O  | 1:A:1617:LEU:N  | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:1965:LYS:O  | 1:A:1969:ASP:N  | 2.07                     | 0.88              |
| 1:A:278:VAL:O   | 1:A:282:LEU:N   | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:579:TRP:O   | 1:A:583:TYR:N   | 2.07                     | 0.88              |
| 1:A:606:LEU:O   | 1:A:609:GLU:N   | 2.04                     | 0.88              |
| 1:A:2774:VAL:H  | 1:A:2877:LEU:HA | 1.38                     | 0.88              |
| 1:A:1469:ILE:O  | 1:A:1473:ILE:N  | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:1722:LEU:O  | 1:A:1726:CYS:N  | 2.05                     | 0.88              |
| 1:A:2545:ILE:O  | 1:A:2549:SER:N  | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:3011:MET:O  | 1:A:3015:GLU:N  | 2.06                     | 0.88              |
| 1:A:2100:TYR:O  | 1:A:2104:TRP:N  | 2.06                     | 0.87              |
| 1:A:27:VAL:O    | 1:A:31:LYS:N    | 2.08                     | 0.87              |
| 1:A:1467:ASP:O  | 1:A:1471:THR:N  | 2.06                     | 0.87              |
| 1:A:2998:ILE:O  | 1:A:3002:PHE:N  | 2.06                     | 0.87              |
| 1:A:97:ILE:O    | 1:A:101:VAL:N   | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:1082:HIS:O  | 1:A:1086:ARG:N  | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:1259:LEU:O  | 1:A:1263:SER:N  | 2.07                     | 0.87              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2128:LEU:O  | 1:A:2132:LEU:N   | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:2466:ALA:O  | 1:A:2470:TYR:N   | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:753:MET:O   | 1:A:757:GLY:N    | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:1954:ALA:O  | 1:A:1958:ALA:N   | 2.08                     | 0.87              |
| 1:A:2015:PRO:O  | 1:A:2019:TYR:N   | 2.08                     | 0.87              |
| 1:A:2723:ARG:HA | 1:A:2726:ALA:HB3 | 1.57                     | 0.87              |
| 1:A:1926:THR:O  | 1:A:1930:ASP:N   | 2.06                     | 0.87              |
| 1:A:2452:LEU:O  | 1:A:2456:LYS:N   | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:2150:ALA:O  | 1:A:2154:GLU:N   | 2.08                     | 0.87              |
| 1:A:2202:TYR:O  | 1:A:2206:GLN:N   | 2.08                     | 0.87              |
| 1:A:2277:GLN:O  | 1:A:2281:TYR:N   | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:2843:ALA:O  | 1:A:2847:GLU:N   | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:309:ARG:O   | 1:A:313:TYR:N    | 2.06                     | 0.87              |
| 1:A:2200:GLU:O  | 1:A:2204:LYS:N   | 2.07                     | 0.87              |
| 1:A:1942:ALA:O  | 1:A:1946:GLN:N   | 2.07                     | 0.86              |
| 1:A:2107:MET:O  | 1:A:2111:HIS:N   | 2.07                     | 0.86              |
| 1:A:3034:LEU:O  | 1:A:3038:GLN:N   | 2.07                     | 0.86              |
| 1:A:2130:ASN:O  | 1:A:2134:SER:N   | 2.08                     | 0.86              |
| 1:A:2332:LEU:O  | 1:A:2336:GLU:N   | 2.07                     | 0.86              |
| 1:A:1426:ALA:O  | 1:A:1431:ASN:N   | 2.08                     | 0.86              |
| 1:A:1598:LEU:O  | 1:A:1602:VAL:N   | 2.07                     | 0.86              |
| 1:A:348:LEU:O   | 1:A:352:ILE:N    | 2.07                     | 0.86              |
| 1:A:1043:VAL:O  | 1:A:1047:LYS:N   | 2.08                     | 0.86              |
| 1:A:2454:ALA:O  | 1:A:2458:ASP:N   | 2.09                     | 0.86              |
| 1:A:2469:ASN:O  | 1:A:2473:CYS:N   | 2.08                     | 0.86              |
| 1:A:2776:ILE:O  | 1:A:2780:LEU:N   | 2.09                     | 0.86              |
| 1:A:232:ILE:O   | 1:A:236:LEU:N    | 2.08                     | 0.86              |
| 1:A:2314:GLN:O  | 1:A:2318:LYS:N   | 2.09                     | 0.86              |
| 1:A:2499:GLU:O  | 1:A:2503:MET:N   | 2.09                     | 0.86              |
| 1:A:2728:MET:O  | 1:A:2732:PHE:N   | 2.08                     | 0.86              |
| 1:A:102:LYS:O   | 1:A:106:LYS:N    | 2.09                     | 0.86              |
| 1:A:504:ASN:O   | 1:A:508:LEU:N    | 2.09                     | 0.86              |
| 1:A:2602:ALA:O  | 1:A:2606:ILE:N   | 2.08                     | 0.85              |
| 1:A:1558:THR:O  | 1:A:1562:LEU:N   | 2.08                     | 0.85              |
| 1:A:1962:ALA:O  | 1:A:1966:SER:N   | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:2383:LYS:O  | 1:A:2387:PHE:N   | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:1912:VAL:O  | 1:A:1916:MET:N   | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:2226:LEU:O  | 1:A:2230:ILE:N   | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:2607:CYS:O  | 1:A:2611:SER:N   | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:2352:ASN:O  | 1:A:2356:ILE:N   | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:439:LEU:O   | 1:A:443:LEU:N    | 2.10                     | 0.85              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1         | Atom-2         | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|----------------|----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1139:GLU:O | 1:A:1143:THR:N | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:1714:MET:O | 1:A:1718:LEU:N | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:1812:ALA:O | 1:A:1816:SER:N | 2.08                     | 0.85              |
| 1:A:1831:CYS:O | 1:A:1835:THR:N | 2.08                     | 0.85              |
| 1:A:1951:HIS:O | 1:A:1955:LEU:N | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:2147:LEU:O | 1:A:2151:ARG:N | 2.08                     | 0.85              |
| 1:A:2175:ARG:O | 1:A:2179:ILE:N | 2.10                     | 0.85              |
| 1:A:1107:LEU:O | 1:A:1111:LEU:N | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:1748:SER:O | 1:A:1751:GLU:N | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:2203:ILE:O | 1:A:2207:LYS:N | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:633:CYS:O  | 1:A:637:GLN:N  | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:2468:GLU:O | 1:A:2472:ASN:N | 2.07                     | 0.85              |
| 1:A:582:PHE:O  | 1:A:586:GLU:N  | 2.09                     | 0.85              |
| 1:A:1261:ILE:O | 1:A:1265:PHE:N | 2.08                     | 0.85              |
| 1:A:3003:ASN:O | 1:A:3007:GLU:N | 2.08                     | 0.85              |
| 1:A:224:LYS:O  | 1:A:228:GLY:N  | 2.08                     | 0.84              |
| 1:A:2017:SER:O | 1:A:2021:CYS:N | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:2252:THR:O | 1:A:2256:VAL:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:1661:HIS:O | 1:A:1665:LYS:N | 2.08                     | 0.84              |
| 1:A:2310:SER:O | 1:A:2314:GLN:N | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:2382:GLY:O | 1:A:2386:ALA:N | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:2502:GLY:O | 1:A:2506:ARG:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:2685:SER:N | 1:A:2705:VAL:O | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:1116:GLN:O | 1:A:1120:PHE:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:105:ILE:O  | 1:A:109:ASN:N  | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:1958:ALA:O | 1:A:1962:ALA:N | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:2258:LEU:O | 1:A:2262:ALA:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:2360:TYR:O | 1:A:2364:ALA:N | 2.11                     | 0.84              |
| 1:A:2002:GLN:O | 1:A:2006:LEU:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:2007:GLU:O | 1:A:2011:SER:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:2599:THR:O | 1:A:2603:ASN:N | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:993:HIS:O  | 1:A:997:VAL:N  | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:1593:GLU:O | 1:A:1597:PHE:N | 2.09                     | 0.84              |
| 1:A:2222:PRO:O | 1:A:2226:LEU:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:2743:THR:O | 1:A:2747:LYS:N | 2.11                     | 0.84              |
| 1:A:845:ASN:O  | 1:A:849:VAL:N  | 2.11                     | 0.84              |
| 1:A:1354:PRO:O | 1:A:1358:SER:N | 2.11                     | 0.84              |
| 1:A:1524:LEU:O | 1:A:1528:VAL:N | 2.11                     | 0.84              |
| 1:A:1739:ASN:O | 1:A:1743:THR:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:1968:ASP:O | 1:A:1972:LYS:N | 2.10                     | 0.84              |
| 1:A:2471:ILE:O | 1:A:2475:LEU:N | 2.10                     | 0.84              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1         | Atom-2         | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|----------------|----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:60:VAL:O   | 1:A:64:LEU:N   | 2.11                     | 0.83              |
| 1:A:120:LEU:O  | 1:A:124:ILE:N  | 2.11                     | 0.83              |
| 1:A:1959:GLU:O | 1:A:1963:ASP:N | 2.10                     | 0.83              |
| 1:A:2736:ASN:O | 1:A:2740:GLN:N | 2.11                     | 0.83              |
| 1:A:117:CYS:O  | 1:A:121:LEU:N  | 2.12                     | 0.83              |
| 1:A:849:VAL:O  | 1:A:853:SER:N  | 2.09                     | 0.83              |
| 1:A:2102:ALA:O | 1:A:2106:ASN:N | 2.10                     | 0.83              |
| 1:A:2340:VAL:O | 1:A:2344:TRP:N | 2.11                     | 0.83              |
| 1:A:1857:SER:O | 1:A:1861:LEU:N | 2.10                     | 0.83              |
| 1:A:1945:ALA:O | 1:A:1949:ALA:N | 2.11                     | 0.83              |
| 1:A:2727:VAL:O | 1:A:2731:VAL:N | 2.09                     | 0.83              |
| 1:A:121:LEU:O  | 1:A:125:MET:N  | 2.10                     | 0.83              |
| 1:A:1045:CYS:O | 1:A:1049:LEU:N | 2.11                     | 0.83              |
| 1:A:2501:ASN:O | 1:A:2505:LYS:N | 2.12                     | 0.83              |
| 1:A:1478:GLN:O | 1:A:1482:CYS:N | 2.09                     | 0.83              |
| 1:A:2359:THR:O | 1:A:2363:LYS:N | 2.09                     | 0.83              |
| 1:A:2927:PHE:O | 1:A:2931:CYS:N | 2.11                     | 0.83              |
| 1:A:266:TRP:O  | 1:A:270:ARG:N  | 2.10                     | 0.83              |
| 1:A:1080:ASP:O | 1:A:1084:GLN:N | 2.10                     | 0.83              |
| 1:A:1366:CYS:O | 1:A:1370:GLY:N | 2.12                     | 0.83              |
| 1:A:2487:LEU:O | 1:A:2491:TRP:N | 2.12                     | 0.83              |
| 1:A:1198:SER:O | 1:A:1202:GLY:N | 2.12                     | 0.83              |
| 1:A:1971:GLU:O | 1:A:1975:LEU:N | 2.12                     | 0.83              |
| 1:A:254:LEU:O  | 1:A:258:ILE:N  | 2.12                     | 0.82              |
| 1:A:1077:PHE:O | 1:A:1081:ASN:N | 2.10                     | 0.82              |
| 1:A:3010:LEU:O | 1:A:3014:GLN:N | 2.10                     | 0.82              |
| 1:A:1109:LYS:O | 1:A:1113:LEU:N | 2.12                     | 0.82              |
| 1:A:1596:HIS:O | 1:A:1600:VAL:N | 2.09                     | 0.82              |
| 1:A:1967:MET:O | 1:A:1971:GLU:N | 2.10                     | 0.82              |
| 1:A:2913:ASP:O | 1:A:2917:GLY:N | 2.12                     | 0.82              |
| 1:A:2930:CYS:O | 1:A:2934:THR:N | 2.10                     | 0.82              |
| 1:A:2546:SER:O | 1:A:2550:MET:N | 2.12                     | 0.82              |
| 1:A:3004:LYS:O | 1:A:3008:ARG:N | 2.11                     | 0.82              |
| 1:A:479:ASP:O  | 1:A:483:LEU:N  | 2.13                     | 0.82              |
| 1:A:1070:VAL:O | 1:A:1074:PHE:N | 2.11                     | 0.82              |
| 1:A:1263:SER:O | 1:A:1267:GLU:N | 2.11                     | 0.82              |
| 1:A:2248:LYS:O | 1:A:2252:THR:N | 2.11                     | 0.82              |
| 1:A:2745:THR:O | 1:A:2749:LYS:N | 2.12                     | 0.82              |
| 1:A:1371:ASP:O | 1:A:1375:ALA:N | 2.12                     | 0.82              |
| 1:A:2331:LYS:O | 1:A:2335:THR:N | 2.12                     | 0.82              |
| 1:A:747:GLN:O  | 1:A:751:SER:N  | 2.12                     | 0.82              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1466:ARG:O  | 1:A:1470:TYR:N  | 2.12                     | 0.81              |
| 1:A:1465:LEU:O  | 1:A:1469:ILE:N  | 2.11                     | 0.81              |
| 1:A:1930:ASP:O  | 1:A:1934:LEU:N  | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:2008:ILE:O  | 1:A:2012:ILE:N  | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:2353:PRO:O  | 1:A:2357:MET:N  | 2.11                     | 0.81              |
| 1:A:1106:ARG:O  | 1:A:1110:ALA:N  | 2.11                     | 0.81              |
| 1:A:2201:VAL:O  | 1:A:2205:TRP:N  | 2.11                     | 0.81              |
| 1:A:2797:SER:O  | 1:A:2801:CYS:N  | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:629:SER:O   | 1:A:633:CYS:N   | 2.12                     | 0.81              |
| 1:A:1571:PHE:O  | 1:A:1575:ARG:N  | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:831:ASP:O   | 1:A:835:VAL:N   | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:855:MET:O   | 1:A:859:ASN:N   | 2.12                     | 0.81              |
| 1:A:1643:ILE:O  | 1:A:1647:LEU:N  | 2.11                     | 0.81              |
| 1:A:2297:GLN:O  | 1:A:2301:ALA:N  | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:279:ILE:O   | 1:A:283:PHE:N   | 2.12                     | 0.81              |
| 1:A:2249:ASP:O  | 1:A:2253:LYS:N  | 2.12                     | 0.81              |
| 1:A:3012:ARG:O  | 1:A:3016:LYS:N  | 2.14                     | 0.81              |
| 1:A:13:ARG:O    | 1:A:17:HIS:N    | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:1658:ALA:O  | 1:A:1662:THR:N  | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:2622:ALA:O  | 1:A:2626:ALA:N  | 2.13                     | 0.81              |
| 1:A:2143:PHE:O  | 1:A:2147:LEU:N  | 2.13                     | 0.80              |
| 1:A:1491:PHE:O  | 1:A:1495:CYS:N  | 2.11                     | 0.80              |
| 1:A:1493:LEU:O  | 1:A:1497:LEU:N  | 2.11                     | 0.80              |
| 1:A:1703:PHE:O  | 1:A:1707:GLU:N  | 2.13                     | 0.80              |
| 1:A:2274:ALA:O  | 1:A:2278:ILE:N  | 2.12                     | 0.80              |
| 1:A:2333:THR:O  | 1:A:2337:CYS:N  | 2.12                     | 0.80              |
| 1:A:170:VAL:O   | 1:A:174:LEU:N   | 2.12                     | 0.80              |
| 1:A:1702:LEU:O  | 1:A:1706:LYS:N  | 2.14                     | 0.80              |
| 1:A:2343:ASN:O  | 1:A:2347:GLU:N  | 2.15                     | 0.80              |
| 1:A:998:VAL:O   | 1:A:1002:GLY:N  | 2.15                     | 0.80              |
| 1:A:2096:GLU:O  | 1:A:2100:TYR:N  | 2.15                     | 0.80              |
| 1:A:2247:ILE:O  | 1:A:2251:LEU:N  | 2.14                     | 0.80              |
| 1:A:2300:TRP:HA | 1:A:2303:LYS:HA | 1.63                     | 0.80              |
| 1:A:2245:GLU:O  | 1:A:2249:ASP:N  | 2.15                     | 0.79              |
| 1:A:2450:LEU:O  | 1:A:2454:ALA:N  | 2.13                     | 0.79              |
| 1:A:1611:LEU:O  | 1:A:1615:LYS:N  | 2.14                     | 0.79              |
| 1:A:3028:VAL:O  | 1:A:3032:VAL:N  | 2.10                     | 0.79              |
| 1:A:2842:PRO:O  | 1:A:2846:PHE:N  | 2.13                     | 0.79              |
| 1:A:43:LEU:HA   | 1:A:60:VAL:N    | 1.98                     | 0.79              |
| 1:A:686:LEU:O   | 1:A:690:LEU:N   | 2.14                     | 0.79              |
| 1:A:2490:LEU:O  | 1:A:2494:ASN:N  | 2.14                     | 0.79              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2         | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:39:THR:O    | 1:A:43:LEU:N   | 2.13                     | 0.79              |
| 1:A:714:THR:O   | 1:A:718:CYS:N  | 2.13                     | 0.79              |
| 1:A:2151:ARG:O  | 1:A:2155:VAL:N | 2.14                     | 0.79              |
| 1:A:459:LEU:O   | 1:A:463:ALA:N  | 2.13                     | 0.79              |
| 1:A:1191:LYS:O  | 1:A:1194:LEU:N | 2.15                     | 0.79              |
| 1:A:1428:GLU:O  | 1:A:1432:VAL:N | 2.16                     | 0.79              |
| 1:A:1430:ASN:O  | 1:A:1434:LYS:N | 2.15                     | 0.79              |
| 1:A:1856:GLU:O  | 1:A:1860:ASN:N | 2.11                     | 0.79              |
| 1:A:2779:PHE:O  | 1:A:2783:ASN:N | 2.15                     | 0.79              |
| 1:A:308:TRP:O   | 1:A:312:LEU:N  | 2.14                     | 0.79              |
| 1:A:1519:VAL:O  | 1:A:1522:GLY:N | 2.14                     | 0.79              |
| 1:A:1480:PRO:HA | 1:A:1484:MET:N | 1.96                     | 0.79              |
| 1:A:2778:GLU:O  | 1:A:2782:ASN:N | 2.15                     | 0.79              |
| 1:A:7:ASP:O     | 1:A:11:CYS:N   | 2.15                     | 0.79              |
| 1:A:1153:VAL:O  | 1:A:1157:LEU:N | 2.13                     | 0.79              |
| 1:A:1867:GLN:O  | 1:A:1871:THR:N | 2.13                     | 0.79              |
| 1:A:61:PHE:O    | 1:A:65:GLN:N   | 2.14                     | 0.78              |
| 1:A:1832:GLU:O  | 1:A:1836:ASP:N | 2.16                     | 0.78              |
| 1:A:29:LYS:O    | 1:A:33:LEU:N   | 2.12                     | 0.78              |
| 1:A:116:LYS:O   | 1:A:120:LEU:N  | 2.17                     | 0.78              |
| 1:A:461:GLU:O   | 1:A:465:CYS:N  | 2.12                     | 0.78              |
| 1:A:2156:GLU:O  | 1:A:2160:LYS:N | 2.16                     | 0.78              |
| 1:A:2250:ILE:O  | 1:A:2254:HIS:N | 2.14                     | 0.78              |
| 1:A:2451:ALA:O  | 1:A:2455:LEU:N | 2.13                     | 0.78              |
| 1:A:2722:LEU:O  | 1:A:2726:ALA:N | 2.15                     | 0.78              |
| 1:A:1964:LYS:O  | 1:A:1968:ASP:N | 2.12                     | 0.78              |
| 1:A:2169:LEU:O  | 1:A:2173:LEU:N | 2.16                     | 0.78              |
| 1:A:3029:GLY:O  | 1:A:3033:ASN:N | 2.13                     | 0.78              |
| 1:A:1288:PRO:O  | 1:A:1291:LEU:N | 2.10                     | 0.78              |
| 1:A:1878:SER:O  | 1:A:1882:ARG:N | 2.15                     | 0.78              |
| 1:A:1058:TRP:O  | 1:A:1061:LEU:N | 2.16                     | 0.78              |
| 1:A:583:TYR:O   | 1:A:587:GLY:N  | 2.17                     | 0.78              |
| 1:A:693:CYS:O   | 1:A:697:LEU:N  | 2.15                     | 0.78              |
| 1:A:1830:MET:O  | 1:A:1834:LYS:N | 2.14                     | 0.78              |
| 1:A:561:GLN:O   | 1:A:565:GLU:N  | 2.17                     | 0.78              |
| 1:A:2692:LEU:HA | 1:A:2701:ILE:H | 1.47                     | 0.78              |
| 1:A:1606:LEU:C  | 1:A:1608:LEU:H | 1.90                     | 0.78              |
| 1:A:194:VAL:O   | 1:A:198:CYS:N  | 2.17                     | 0.78              |
| 1:A:1382:PRO:O  | 1:A:1386:ILE:N | 2.16                     | 0.78              |
| 1:A:1904:LYS:O  | 1:A:1908:THR:N | 2.16                     | 0.77              |
| 1:A:2014:GLU:O  | 1:A:2018:LEU:N | 2.16                     | 0.77              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1         | Atom-2         | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|----------------|----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2358:GLN:O | 1:A:2362:GLU:N | 2.13                     | 0.77              |
| 1:A:1136:HIS:O | 1:A:1139:GLU:N | 2.17                     | 0.77              |
| 1:A:2608:THR:O | 1:A:2612:ARG:N | 2.15                     | 0.77              |
| 1:A:2936:GLU:O | 1:A:2940:ASN:N | 2.13                     | 0.77              |
| 1:A:2379:LEU:O | 1:A:2383:LYS:N | 2.16                     | 0.77              |
| 1:A:2735:CYS:O | 1:A:2739:LEU:N | 2.13                     | 0.77              |
| 1:A:2999:ASP:O | 1:A:3003:ASN:N | 2.14                     | 0.77              |
| 1:A:878:THR:O  | 1:A:882:ILE:N  | 2.15                     | 0.77              |
| 1:A:1258:HIS:O | 1:A:1262:ARG:N | 2.14                     | 0.77              |
| 1:A:2313:LYS:O | 1:A:2317:LYS:N | 2.13                     | 0.77              |
| 1:A:2406:LYS:O | 1:A:2410:PHE:N | 2.14                     | 0.77              |
| 1:A:2922:GLY:O | 1:A:2925:GLY:N | 2.13                     | 0.77              |
| 1:A:2334:TYR:O | 1:A:2338:LEU:N | 2.16                     | 0.77              |
| 1:A:2617:VAL:O | 1:A:2620:VAL:N | 2.17                     | 0.77              |
| 1:A:1516:HIS:O | 1:A:1520:ILE:N | 2.16                     | 0.77              |
| 1:A:70:LYS:O   | 1:A:74:CYS:N   | 2.17                     | 0.77              |
| 1:A:562:ASN:O  | 1:A:566:VAL:N  | 2.12                     | 0.77              |
| 1:A:1054:PRO:O | 1:A:1057:LYS:N | 2.18                     | 0.77              |
| 1:A:1999:ILE:O | 1:A:2003:ASP:N | 2.17                     | 0.77              |
| 1:A:2853:THR:O | 1:A:2857:ALA:N | 2.15                     | 0.77              |
| 1:A:1813:PHE:O | 1:A:1817:GLY:N | 2.18                     | 0.76              |
| 1:A:2500:VAL:O | 1:A:2504:MET:N | 2.14                     | 0.76              |
| 1:A:557:MET:O  | 1:A:561:GLN:N  | 2.16                     | 0.76              |
| 1:A:2251:LEU:O | 1:A:2255:LEU:N | 2.13                     | 0.76              |
| 1:A:28:GLU:O   | 1:A:32:ARG:N   | 2.13                     | 0.76              |
| 1:A:2782:ASN:O | 1:A:2786:GLY:N | 2.18                     | 0.76              |
| 1:A:185:VAL:O  | 1:A:189:ARG:N  | 2.18                     | 0.76              |
| 1:A:1550:LYS:O | 1:A:1554:ASN:N | 2.17                     | 0.76              |
| 1:A:1751:GLU:O | 1:A:1755:MET:N | 2.19                     | 0.76              |
| 1:A:2124:TYR:O | 1:A:2128:LEU:N | 2.13                     | 0.76              |
| 1:A:2168:SER:O | 1:A:2172:THR:N | 2.16                     | 0.76              |
| 1:A:2208:HIS:O | 1:A:2212:LEU:N | 2.17                     | 0.76              |
| 1:A:2273:ARG:O | 1:A:2277:GLN:N | 2.12                     | 0.76              |
| 1:A:2462:PHE:O | 1:A:2466:ALA:N | 2.12                     | 0.76              |
| 1:A:2261:LEU:O | 1:A:2265:PHE:N | 2.13                     | 0.76              |
| 1:A:3042:PRO:O | 1:A:3046:SER:N | 2.16                     | 0.76              |
| 1:A:850:GLU:O  | 1:A:854:SER:N  | 2.17                     | 0.76              |
| 1:A:1073:VAL:O | 1:A:1077:PHE:N | 2.14                     | 0.76              |
| 1:A:1213:HIS:O | 1:A:1216:TYR:N | 2.18                     | 0.76              |
| 1:A:2345:LEU:O | 1:A:2349:CYS:N | 2.18                     | 0.76              |
| 1:A:2407:SER:O | 1:A:2411:GLU:N | 2.18                     | 0.76              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:104:PHE:O   | 1:A:108:ALA:N   | 2.17                     | 0.76              |
| 1:A:2319:LEU:O  | 1:A:2323:CYS:N  | 2.19                     | 0.76              |
| 1:A:520:ASP:O   | 1:A:524:TRP:N   | 2.16                     | 0.75              |
| 1:A:1911:ALA:O  | 1:A:1915:TYR:N  | 2.17                     | 0.75              |
| 1:A:1941:VAL:O  | 1:A:1945:ALA:N  | 2.14                     | 0.75              |
| 1:A:2318:LYS:O  | 1:A:2322:SER:N  | 2.15                     | 0.75              |
| 1:A:2559:ILE:O  | 1:A:2563:LEU:N  | 2.13                     | 0.75              |
| 1:A:713:GLU:O   | 1:A:717:ARG:N   | 2.16                     | 0.75              |
| 1:A:830:PHE:O   | 1:A:834:GLU:N   | 2.18                     | 0.75              |
| 1:A:1738:LYS:O  | 1:A:1742:ALA:N  | 2.15                     | 0.75              |
| 1:A:168:PHE:O   | 1:A:172:PHE:N   | 2.15                     | 0.75              |
| 1:A:507:LEU:HA  | 1:A:510:ALA:HB3 | 1.66                     | 0.75              |
| 1:A:1663:GLY:O  | 1:A:1667:VAL:N  | 2.19                     | 0.75              |
| 1:A:2693:ALA:N  | 1:A:2699:PRO:O  | 2.19                     | 0.75              |
| 1:A:580:LEU:O   | 1:A:584:GLN:N   | 2.17                     | 0.75              |
| 1:A:1902:ASP:O  | 1:A:1906:GLN:N  | 2.18                     | 0.75              |
| 1:A:2019:TYR:O  | 1:A:2023:GLY:N  | 2.19                     | 0.75              |
| 1:A:2626:ALA:O  | 1:A:2630:LEU:N  | 2.17                     | 0.75              |
| 1:A:2821:MET:O  | 1:A:2825:GLN:N  | 2.15                     | 0.75              |
| 1:A:444:PRO:O   | 1:A:448:HIS:N   | 2.18                     | 0.75              |
| 1:A:1396:CYS:HA | 1:A:1400:LYS:H  | 1.51                     | 0.75              |
| 1:A:2205:TRP:O  | 1:A:2209:SER:N  | 2.13                     | 0.75              |
| 1:A:1122:ASN:O  | 1:A:1125:LEU:N  | 2.19                     | 0.75              |
| 1:A:1886:PRO:O  | 1:A:1890:ASP:N  | 2.15                     | 0.75              |
| 1:A:2001:LEU:O  | 1:A:2005:LEU:N  | 2.16                     | 0.75              |
| 1:A:1953:THR:O  | 1:A:1957:TYR:N  | 2.19                     | 0.75              |
| 1:A:2123:SER:O  | 1:A:2127:SER:N  | 2.17                     | 0.75              |
| 1:A:2364:ALA:O  | 1:A:2368:ALA:N  | 2.19                     | 0.75              |
| 1:A:2553:PRO:O  | 1:A:2557:LEU:N  | 2.19                     | 0.75              |
| 1:A:2227:ARG:O  | 1:A:2231:LEU:N  | 2.15                     | 0.74              |
| 1:A:1240:ASN:O  | 1:A:1244:ILE:N  | 2.19                     | 0.74              |
| 1:A:1640:GLN:O  | 1:A:1643:ILE:N  | 2.18                     | 0.74              |
| 1:A:1842:LEU:O  | 1:A:1846:ILE:N  | 2.20                     | 0.74              |
| 1:A:2538:HIS:O  | 1:A:2542:ASN:N  | 2.14                     | 0.74              |
| 1:A:233:LEU:O   | 1:A:237:THR:N   | 2.17                     | 0.74              |
| 1:A:264:TYR:O   | 1:A:268:GLN:N   | 2.12                     | 0.74              |
| 1:A:1966:SER:O  | 1:A:1970:GLN:N  | 2.15                     | 0.74              |
| 1:A:2125:HIS:O  | 1:A:2129:TYR:N  | 2.15                     | 0.74              |
| 1:A:2859:SER:O  | 1:A:2863:GLY:N  | 2.21                     | 0.74              |
| 1:A:2950:GLU:O  | 1:A:2953:LEU:N  | 2.20                     | 0.74              |
| 1:A:827:LYS:O   | 1:A:831:ASP:N   | 2.19                     | 0.74              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:701:LEU:O   | 1:A:705:TYR:N    | 2.18                     | 0.74              |
| 1:A:1277:GLU:O  | 1:A:1281:SER:N   | 2.20                     | 0.74              |
| 1:A:2402:GLU:O  | 1:A:2406:LYS:N   | 2.13                     | 0.74              |
| 1:A:2175:ARG:HA | 1:A:2178:ALA:HB3 | 1.70                     | 0.74              |
| 1:A:926:LYS:O   | 1:A:930:LEU:N    | 2.19                     | 0.74              |
| 1:A:2847:GLU:O  | 1:A:2850:LEU:N   | 2.18                     | 0.74              |
| 1:A:149:ILE:O   | 1:A:153:ARG:N    | 2.14                     | 0.73              |
| 1:A:2941:SER:O  | 1:A:2944:THR:N   | 2.20                     | 0.73              |
| 1:A:2154:GLU:O  | 1:A:2158:MET:N   | 2.15                     | 0.73              |
| 1:A:2537:PHE:O  | 1:A:2541:LEU:N   | 2.12                     | 0.73              |
| 1:A:2543:ASN:O  | 1:A:2547:ARG:N   | 2.12                     | 0.73              |
| 1:A:2957:LEU:O  | 1:A:2960:TRP:N   | 2.17                     | 0.73              |
| 1:A:711:ASN:O   | 1:A:715:LEU:N    | 2.17                     | 0.73              |
| 1:A:997:VAL:O   | 1:A:1001:LEU:N   | 2.20                     | 0.73              |
| 1:A:476:GLN:O   | 1:A:480:LEU:N    | 2.14                     | 0.73              |
| 1:A:9:LEU:O     | 1:A:13:ARG:N     | 2.15                     | 0.73              |
| 1:A:481:LEU:O   | 1:A:485:ASN:N    | 2.12                     | 0.73              |
| 1:A:1458:GLY:O  | 1:A:1462:ALA:N   | 2.21                     | 0.73              |
| 1:A:2453:ARG:O  | 1:A:2457:GLU:N   | 2.19                     | 0.73              |
| 1:A:305:SER:O   | 1:A:309:ARG:N    | 2.20                     | 0.73              |
| 1:A:1368:PHE:O  | 1:A:1372:LEU:N   | 2.17                     | 0.73              |
| 1:A:501:GLN:O   | 1:A:505:PHE:N    | 2.14                     | 0.73              |
| 1:A:64:LEU:O    | 1:A:68:ILE:N     | 2.14                     | 0.73              |
| 1:A:1614:LEU:O  | 1:A:1618:ARG:N   | 2.15                     | 0.73              |
| 1:A:1956:LEU:O  | 1:A:1960:ILE:N   | 2.19                     | 0.73              |
| 1:A:150:LEU:O   | 1:A:154:LYS:N    | 2.22                     | 0.73              |
| 1:A:1116:GLN:HA | 1:A:1119:ALA:HB3 | 1.69                     | 0.73              |
| 1:A:1724:GLU:O  | 1:A:1727:VAL:N   | 2.22                     | 0.73              |
| 1:A:1848:ASP:O  | 1:A:1852:GLN:N   | 2.21                     | 0.73              |
| 1:A:524:TRP:O   | 1:A:528:THR:N    | 2.22                     | 0.72              |
| 1:A:1969:ASP:O  | 1:A:1973:ARG:N   | 2.16                     | 0.72              |
| 1:A:1955:LEU:O  | 1:A:1959:GLU:N   | 2.15                     | 0.72              |
| 1:A:2505:LYS:C  | 1:A:2508:GLY:H   | 1.97                     | 0.72              |
| 1:A:1452:ASP:O  | 1:A:1456:GLY:HA3 | 1.90                     | 0.72              |
| 1:A:307:LYS:O   | 1:A:311:ILE:N    | 2.18                     | 0.72              |
| 1:A:2004:LEU:O  | 1:A:2008:ILE:N   | 2.22                     | 0.72              |
| 1:A:26:GLU:O    | 1:A:30:PHE:N     | 2.15                     | 0.72              |
| 1:A:1010:ASN:C  | 1:A:1012:ARG:H   | 1.93                     | 0.72              |
| 1:A:1445:PHE:O  | 1:A:1448:LEU:N   | 2.22                     | 0.72              |
| 1:A:1265:PHE:O  | 1:A:1269:LYS:N   | 2.20                     | 0.72              |
| 1:A:1599:SER:O  | 1:A:1603:TYR:N   | 2.22                     | 0.72              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:416:ALA:O   | 1:A:420:ILE:N    | 2.22                     | 0.72              |
| 1:A:558:GLY:O   | 1:A:562:ASN:N    | 2.18                     | 0.72              |
| 1:A:2820:PHE:O  | 1:A:2824:CYS:N   | 2.19                     | 0.71              |
| 1:A:1083:HIS:O  | 1:A:1087:MET:N   | 2.19                     | 0.71              |
| 1:A:1343:ILE:O  | 1:A:1347:LEU:N   | 2.20                     | 0.71              |
| 1:A:2937:VAL:O  | 1:A:2941:SER:N   | 2.23                     | 0.71              |
| 1:A:95:GLN:O    | 1:A:99:SER:N     | 2.15                     | 0.71              |
| 1:A:1419:LEU:O  | 1:A:1423:CYS:N   | 2.22                     | 0.71              |
| 1:A:2729:GLN:O  | 1:A:2733:GLN:N   | 2.23                     | 0.71              |
| 1:A:415:ILE:O   | 1:A:419:LEU:N    | 2.20                     | 0.71              |
| 1:A:169:SER:O   | 1:A:173:ARG:N    | 2.18                     | 0.71              |
| 1:A:274:SER:HA  | 1:A:278:VAL:H    | 1.55                     | 0.71              |
| 1:A:1594:ILE:O  | 1:A:1598:LEU:N   | 2.16                     | 0.71              |
| 1:A:610:LYS:O   | 1:A:614:SER:N    | 2.23                     | 0.71              |
| 1:A:1120:PHE:O  | 1:A:1123:ALA:N   | 2.24                     | 0.71              |
| 1:A:1490:SER:O  | 1:A:1494:CYS:N   | 2.19                     | 0.71              |
| 1:A:2484:VAL:O  | 1:A:2488:CYS:N   | 2.15                     | 0.71              |
| 1:A:507:LEU:O   | 1:A:511:ILE:N    | 2.17                     | 0.70              |
| 1:A:1737:LEU:O  | 1:A:1741:LEU:N   | 2.23                     | 0.70              |
| 1:A:310:SER:O   | 1:A:314:ASN:N    | 2.24                     | 0.70              |
| 1:A:2244:ARG:O  | 1:A:2248:LYS:N   | 2.16                     | 0.70              |
| 1:A:2335:THR:O  | 1:A:2339:ARG:N   | 2.23                     | 0.70              |
| 1:A:3005:VAL:O  | 1:A:3009:VAL:N   | 2.19                     | 0.70              |
| 1:A:1644:MET:O  | 1:A:1648:VAL:N   | 2.23                     | 0.70              |
| 1:A:2298:VAL:HA | 1:A:2301:ALA:HB3 | 1.73                     | 0.70              |
| 1:A:267:THR:O   | 1:A:271:LEU:N    | 2.22                     | 0.70              |
| 1:A:62:ARG:O    | 1:A:66:LYS:N     | 2.21                     | 0.70              |
| 1:A:1468:VAL:O  | 1:A:1472:LEU:N   | 2.19                     | 0.70              |
| 1:A:42:HIS:O    | 1:A:58:ASP:N     | 2.24                     | 0.70              |
| 1:A:2295:GLU:O  | 1:A:2298:VAL:N   | 2.25                     | 0.70              |
| 1:A:475:SER:O   | 1:A:479:ASP:N    | 2.14                     | 0.70              |
| 1:A:498:GLU:O   | 1:A:502:ALA:N    | 2.17                     | 0.70              |
| 1:A:1105:SER:O  | 1:A:1109:LYS:N   | 2.21                     | 0.70              |
| 1:A:2858:THR:O  | 1:A:2862:VAL:N   | 2.18                     | 0.70              |
| 1:A:1907:ARG:O  | 1:A:1911:ALA:N   | 2.22                     | 0.70              |
| 1:A:2209:SER:O  | 1:A:2213:LYS:N   | 2.25                     | 0.70              |
| 1:A:2472:ASN:O  | 1:A:2476:SER:N   | 2.24                     | 0.70              |
| 1:A:414:GLN:O   | 1:A:418:GLN:N    | 2.24                     | 0.69              |
| 1:A:1139:GLU:O  | 1:A:1142:GLU:N   | 2.25                     | 0.69              |
| 1:A:1515:ASN:O  | 1:A:1519:VAL:N   | 2.23                     | 0.69              |
| 1:A:2204:LYS:O  | 1:A:2208:HIS:N   | 2.20                     | 0.69              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1         | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2281:TYR:O | 1:A:2284:VAL:N  | 2.14                     | 0.69              |
| 1:A:992:ASN:O  | 1:A:996:HIS:N   | 2.19                     | 0.69              |
| 1:A:2534:GLY:O | 1:A:2538:HIS:N  | 2.25                     | 0.69              |
| 1:A:843:ASN:HA | 1:A:846:LEU:H   | 1.56                     | 0.69              |
| 1:A:991:LEU:O  | 1:A:995:LEU:N   | 2.17                     | 0.69              |
| 1:A:2924:GLU:O | 1:A:2928:ARG:N  | 2.24                     | 0.69              |
| 1:A:1578:GLN:O | 1:A:1581:ILE:N  | 2.25                     | 0.69              |
| 1:A:1660:ASN:O | 1:A:1663:GLY:N  | 2.26                     | 0.69              |
| 1:A:2389:SER:O | 1:A:2393:PHE:N  | 2.22                     | 0.69              |
| 1:A:2844:ILE:O | 1:A:2848:LYS:N  | 2.23                     | 0.69              |
| 1:A:163:GLN:O  | 1:A:166:GLU:N   | 2.24                     | 0.69              |
| 1:A:1111:LEU:O | 1:A:1116:GLN:N  | 2.22                     | 0.69              |
| 1:A:2101:GLN:O | 1:A:2105:ARG:N  | 2.26                     | 0.69              |
| 1:A:2174:SER:O | 1:A:2178:ALA:N  | 2.25                     | 0.69              |
| 1:A:2539:GLU:O | 1:A:2543:ASN:N  | 2.16                     | 0.69              |
| 1:A:2774:VAL:C | 1:A:2776:ILE:H  | 1.99                     | 0.69              |
| 1:A:1559:ILE:O | 1:A:1563:ASP:N  | 2.24                     | 0.69              |
| 1:A:2879:ASN:N | 1:A:2884:GLU:O  | 2.26                     | 0.69              |
| 1:A:2774:VAL:N | 1:A:2877:LEU:HA | 2.05                     | 0.69              |
| 1:A:2835:CYS:O | 1:A:2839:PHE:N  | 2.26                     | 0.69              |
| 1:A:2361:LEU:O | 1:A:2365:VAL:N  | 2.16                     | 0.69              |
| 1:A:1438:ILE:O | 1:A:1441:ILE:N  | 2.26                     | 0.69              |
| 1:A:2627:TYR:O | 1:A:2631:ALA:N  | 2.26                     | 0.69              |
| 1:A:3026:LEU:O | 1:A:3031:GLN:N  | 2.25                     | 0.69              |
| 1:A:563:MET:O  | 1:A:567:ASN:N   | 2.26                     | 0.68              |
| 1:A:1381:PHE:O | 1:A:1384:HIS:N  | 2.25                     | 0.68              |
| 1:A:2187:GLU:O | 1:A:2191:ARG:N  | 2.25                     | 0.68              |
| 1:A:2308:ALA:O | 1:A:2312:LEU:N  | 2.19                     | 0.68              |
| 1:A:2403:ASN:O | 1:A:2407:SER:N  | 2.25                     | 0.68              |
| 1:A:163:GLN:H  | 1:A:164:TRP:N   | 1.92                     | 0.68              |
| 1:A:2783:ASN:O | 1:A:2788:HIS:N  | 2.22                     | 0.68              |
| 1:A:208:LYS:O  | 1:A:212:PHE:N   | 2.15                     | 0.68              |
| 1:A:2260:ILE:O | 1:A:2264:THR:N  | 2.19                     | 0.68              |
| 1:A:2720:ASP:N | 1:A:2763:ARG:O  | 2.24                     | 0.68              |
| 1:A:18:ASP:HA  | 1:A:73:GLU:HA   | 1.76                     | 0.68              |
| 1:A:2449:GLU:O | 1:A:2453:ARG:N  | 2.23                     | 0.68              |
| 1:A:2911:THR:O | 1:A:2915:VAL:N  | 2.19                     | 0.68              |
| 1:A:347:GLU:O  | 1:A:351:ASP:N   | 2.23                     | 0.68              |
| 1:A:924:ARG:O  | 1:A:928:LEU:N   | 2.24                     | 0.68              |
| 1:A:41:LYS:O   | 1:A:45:ARG:N    | 2.27                     | 0.67              |
| 1:A:832:ARG:O  | 1:A:836:GLU:N   | 2.26                     | 0.67              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1         | Atom-2         | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|----------------|----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:634:GLU:O  | 1:A:638:LYS:N  | 2.27                     | 0.67              |
| 1:A:827:LYS:HA | 1:A:830:PHE:CB | 2.24                     | 0.67              |
| 1:A:190:ILE:O  | 1:A:194:VAL:N  | 2.18                     | 0.67              |
| 1:A:521:ARG:O  | 1:A:525:LYS:N  | 2.28                     | 0.67              |
| 1:A:846:LEU:O  | 1:A:850:GLU:N  | 2.21                     | 0.67              |
| 1:A:2262:ALA:O | 1:A:2266:LYS:N | 2.28                     | 0.67              |
| 1:A:2224:MET:O | 1:A:2228:THR:N | 2.21                     | 0.67              |
| 1:A:253:GLU:O  | 1:A:257:GLU:N  | 2.15                     | 0.67              |
| 1:A:1074:PHE:O | 1:A:1078:LEU:N | 2.20                     | 0.67              |
| 1:A:2863:GLY:O | 1:A:2867:GLY:N | 2.26                     | 0.67              |
| 1:A:2798:ALA:O | 1:A:2802:GLN:N | 2.28                     | 0.67              |
| 1:A:5:LEU:O    | 1:A:9:LEU:N    | 2.23                     | 0.67              |
| 1:A:694:LEU:O  | 1:A:698:SER:N  | 2.28                     | 0.67              |
| 1:A:1191:LYS:C | 1:A:1194:LEU:H | 2.01                     | 0.67              |
| 1:A:1713:ILE:O | 1:A:1717:TYR:N | 2.20                     | 0.67              |
| 1:A:2503:MET:O | 1:A:2507:ASP:N | 2.23                     | 0.67              |
| 1:A:2081:LEU:O | 1:A:2085:ASP:N | 2.17                     | 0.67              |
| 1:A:341:VAL:O  | 1:A:345:LEU:N  | 2.27                     | 0.67              |
| 1:A:631:PRO:O  | 1:A:635:HIS:N  | 2.23                     | 0.67              |
| 1:A:689:SER:O  | 1:A:692:ARG:N  | 2.28                     | 0.67              |
| 1:A:1117:GLN:O | 1:A:1121:GLU:N | 2.23                     | 0.67              |
| 1:A:325:HIS:O  | 1:A:341:VAL:N  | 2.28                     | 0.66              |
| 1:A:519:VAL:O  | 1:A:522:GLU:N  | 2.26                     | 0.66              |
| 1:A:1847:HIS:O | 1:A:1851:LEU:N | 2.22                     | 0.66              |
| 1:A:25:LYS:O   | 1:A:29:LYS:N   | 2.24                     | 0.66              |
| 1:A:929:MET:O  | 1:A:932:ASP:N  | 2.27                     | 0.66              |
| 1:A:2948:ILE:O | 1:A:2952:LEU:N | 2.26                     | 0.66              |
| 1:A:118:GLN:O  | 1:A:122:ASN:N  | 2.28                     | 0.66              |
| 1:A:2317:LYS:O | 1:A:2321:ALA:N | 2.24                     | 0.66              |
| 1:A:1765:GLN:O | 1:A:1768:ARG:N | 2.28                     | 0.66              |
| 1:A:1396:CYS:O | 1:A:1400:LYS:N | 2.28                     | 0.66              |
| 1:A:2152:VAL:O | 1:A:2156:GLU:N | 2.22                     | 0.66              |
| 1:A:2823:VAL:O | 1:A:2827:PHE:N | 2.29                     | 0.66              |
| 1:A:191:ILE:O  | 1:A:195:THR:N  | 2.22                     | 0.66              |
| 1:A:1717:TYR:O | 1:A:1721:THR:N | 2.20                     | 0.66              |
| 1:A:3013:LEU:O | 1:A:3017:LEU:N | 2.26                     | 0.66              |
| 1:A:2795:ASP:O | 1:A:2799:PHE:N | 2.28                     | 0.66              |
| 1:A:2726:ALA:O | 1:A:2730:GLN:N | 2.22                     | 0.66              |
| 1:A:1704:GLU:O | 1:A:1708:LEU:N | 2.29                     | 0.66              |
| 1:A:1041:ALA:O | 1:A:1043:VAL:N | 2.29                     | 0.65              |
| 1:A:1741:LEU:O | 1:A:1744:LYS:N | 2.30                     | 0.65              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2815:GLU:O  | 1:A:2819:VAL:N   | 2.29                     | 0.65              |
| 1:A:171:TYR:O   | 1:A:175:TYR:N    | 2.27                     | 0.65              |
| 1:A:205:LEU:O   | 1:A:208:LYS:N    | 2.22                     | 0.65              |
| 1:A:847:MET:O   | 1:A:851:ASP:N    | 2.23                     | 0.65              |
| 1:A:2557:LEU:O  | 1:A:2561:LEU:N   | 2.18                     | 0.65              |
| 1:A:2540:VAL:O  | 1:A:2544:LEU:N   | 2.20                     | 0.65              |
| 1:A:458:CYS:O   | 1:A:462:VAL:N    | 2.22                     | 0.65              |
| 1:A:1395:ASN:O  | 1:A:1399:THR:N   | 2.21                     | 0.65              |
| 1:A:1928:PHE:O  | 1:A:1932:PHE:N   | 2.23                     | 0.65              |
| 1:A:2178:ALA:O  | 1:A:2181:GLU:N   | 2.30                     | 0.65              |
| 1:A:118:GLN:HA  | 1:A:122:ASN:H    | 1.60                     | 0.65              |
| 1:A:1016:GLY:O  | 1:A:1020:THR:N   | 2.30                     | 0.65              |
| 1:A:1591:LEU:N  | 1:A:1594:ILE:H   | 1.94                     | 0.65              |
| 1:A:1600:VAL:O  | 1:A:1604:ASP:N   | 2.30                     | 0.65              |
| 1:A:2780:LEU:O  | 1:A:2784:GLU:N   | 2.19                     | 0.65              |
| 1:A:101:VAL:O   | 1:A:105:ILE:N    | 2.19                     | 0.65              |
| 1:A:2694:GLY:C  | 1:A:2698:LEU:HA  | 2.22                     | 0.65              |
| 1:A:230:ASN:O   | 1:A:234:ALA:N    | 2.19                     | 0.64              |
| 1:A:1003:GLN:O  | 1:A:1007:ASP:N   | 2.24                     | 0.64              |
| 1:A:2873:VAL:O  | 1:A:2876:ILE:N   | 2.30                     | 0.64              |
| 1:A:1241:TYR:O  | 1:A:1245:GLU:N   | 2.26                     | 0.64              |
| 1:A:995:LEU:O   | 1:A:998:VAL:N    | 2.30                     | 0.64              |
| 1:A:42:HIS:C    | 1:A:59:ALA:H     | 2.05                     | 0.64              |
| 1:A:1453:ILE:O  | 1:A:1458:GLY:N   | 2.30                     | 0.64              |
| 1:A:1544:TYR:O  | 1:A:1547:ILE:N   | 2.31                     | 0.64              |
| 1:A:1739:ASN:HA | 1:A:1742:ALA:HB3 | 1.79                     | 0.64              |
| 1:A:1868:GLY:O  | 1:A:1872:SER:N   | 2.19                     | 0.64              |
| 1:A:2181:GLU:O  | 1:A:2185:ILE:N   | 2.30                     | 0.64              |
| 1:A:1396:CYS:CA | 1:A:1400:LYS:H   | 2.11                     | 0.64              |
| 1:A:2356:ILE:O  | 1:A:2361:LEU:N   | 2.28                     | 0.64              |
| 1:A:3003:ASN:HA | 1:A:3006:ALA:HB3 | 1.78                     | 0.64              |
| 1:A:3043:LYS:O  | 1:A:3047:ARG:N   | 2.30                     | 0.64              |
| 1:A:187:VAL:O   | 1:A:190:ILE:N    | 2.31                     | 0.64              |
| 1:A:1078:LEU:O  | 1:A:1082:HIS:N   | 2.22                     | 0.64              |
| 1:A:1152:SER:O  | 1:A:1156:THR:N   | 2.20                     | 0.64              |
| 1:A:1217:LEU:O  | 1:A:1220:GLU:N   | 2.28                     | 0.64              |
| 1:A:1478:GLN:HA | 1:A:1481:SER:CB  | 2.28                     | 0.64              |
| 1:A:2464:CYS:O  | 1:A:2468:GLU:N   | 2.19                     | 0.63              |
| 1:A:2880:GLU:C  | 1:A:2883:ALA:H   | 2.06                     | 0.63              |
| 1:A:158:GLU:O   | 1:A:161:GLN:N    | 2.31                     | 0.63              |
| 1:A:1929:ASN:O  | 1:A:1933:TRP:N   | 2.21                     | 0.63              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2148:LYS:O  | 1:A:2152:VAL:N  | 2.17                     | 0.63              |
| 1:A:2228:THR:O  | 1:A:2232:GLU:N  | 2.30                     | 0.63              |
| 1:A:2512:PRO:O  | 1:A:2516:PHE:N  | 2.28                     | 0.63              |
| 1:A:2123:SER:N  | 1:A:2126:GLU:H  | 1.97                     | 0.63              |
| 1:A:2356:ILE:HA | 1:A:2360:TYR:H  | 1.64                     | 0.63              |
| 1:A:1041:ALA:C  | 1:A:1043:VAL:H  | 2.07                     | 0.63              |
| 1:A:2077:LEU:O  | 1:A:2081:LEU:N  | 2.26                     | 0.63              |
| 1:A:730:CYS:O   | 1:A:734:VAL:N   | 2.32                     | 0.63              |
| 1:A:1426:ALA:HA | 1:A:1430:ASN:H  | 1.62                     | 0.63              |
| 1:A:1888:ASN:O  | 1:A:1892:GLU:N  | 2.31                     | 0.63              |
| 1:A:2078:SER:O  | 1:A:2082:LYS:N  | 2.32                     | 0.63              |
| 1:A:478:SER:O   | 1:A:482:LYS:N   | 2.22                     | 0.62              |
| 1:A:884:PRO:O   | 1:A:888:GLU:N   | 2.32                     | 0.62              |
| 1:A:1243:ASN:O  | 1:A:1247:PHE:N  | 2.33                     | 0.62              |
| 1:A:482:LYS:O   | 1:A:486:LYS:N   | 2.20                     | 0.62              |
| 1:A:2777:GLY:O  | 1:A:2781:VAL:N  | 2.27                     | 0.62              |
| 1:A:2621:GLU:O  | 1:A:2625:ASP:N  | 2.19                     | 0.62              |
| 1:A:3001:SER:O  | 1:A:3005:VAL:N  | 2.23                     | 0.62              |
| 1:A:2513:THR:HA | 1:A:2516:PHE:CB | 2.30                     | 0.62              |
| 1:A:190:ILE:HA  | 1:A:193:ALA:HB3 | 1.82                     | 0.62              |
| 1:A:1425:GLN:O  | 1:A:1429:THR:N  | 2.24                     | 0.62              |
| 1:A:560:GLU:O   | 1:A:564:CYS:N   | 2.26                     | 0.62              |
| 1:A:1420:LEU:O  | 1:A:1424:GLU:N  | 2.32                     | 0.62              |
| 1:A:1457:LEU:O  | 1:A:1461:TRP:N  | 2.26                     | 0.62              |
| 1:A:1072:GLU:O  | 1:A:1076:GLN:N  | 2.20                     | 0.62              |
| 1:A:1970:GLN:O  | 1:A:1974:SER:N  | 2.21                     | 0.62              |
| 1:A:2197:GLN:O  | 1:A:2201:VAL:N  | 2.24                     | 0.62              |
| 1:A:2650:ASP:N  | 1:A:2689:GLU:HA | 2.15                     | 0.62              |
| 1:A:843:ASN:O   | 1:A:847:MET:N   | 2.27                     | 0.61              |
| 1:A:1607:PRO:O  | 1:A:1608:LEU:C  | 2.43                     | 0.61              |
| 1:A:339:ILE:O   | 1:A:343:GLU:N   | 2.28                     | 0.61              |
| 1:A:2682:THR:O  | 1:A:2707:SER:N  | 2.24                     | 0.61              |
| 1:A:2723:ARG:O  | 1:A:2727:VAL:N  | 2.30                     | 0.61              |
| 1:A:210:LEU:O   | 1:A:214:SER:N   | 2.32                     | 0.61              |
| 1:A:1010:ASN:C  | 1:A:1012:ARG:N  | 2.56                     | 0.61              |
| 1:A:2129:TYR:O  | 1:A:2133:GLN:N  | 2.18                     | 0.61              |
| 1:A:1463:PHE:O  | 1:A:1467:ASP:N  | 2.19                     | 0.61              |
| 1:A:2399:GLN:O  | 1:A:2403:ASN:N  | 2.28                     | 0.61              |
| 1:A:1110:ALA:O  | 1:A:1115:LEU:N  | 2.31                     | 0.61              |
| 1:A:1243:ASN:O  | 1:A:1246:ASP:N  | 2.34                     | 0.61              |
| 1:A:2488:CYS:O  | 1:A:2492:LEU:N  | 2.22                     | 0.61              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:306:THR:O   | 1:A:310:SER:N   | 2.24                     | 0.61              |
| 1:A:1612:GLU:O  | 1:A:1616:ASP:N  | 2.20                     | 0.61              |
| 1:A:2722:LEU:O  | 1:A:2725:ASP:N  | 2.34                     | 0.61              |
| 1:A:2932:GLU:O  | 1:A:2936:GLU:N  | 2.32                     | 0.61              |
| 1:A:2170:TYR:O  | 1:A:2173:LEU:N  | 2.33                     | 0.61              |
| 1:A:2362:GLU:O  | 1:A:2366:GLU:N  | 2.25                     | 0.61              |
| 1:A:2949:VAL:O  | 1:A:2953:LEU:N  | 2.34                     | 0.61              |
| 1:A:2217:PHE:O  | 1:A:2221:GLU:N  | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:1014:ALA:O  | 1:A:1017:GLN:N  | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:2783:ASN:C  | 1:A:2786:GLY:H  | 2.09                     | 0.60              |
| 1:A:2880:GLU:O  | 1:A:2883:ALA:N  | 2.33                     | 0.60              |
| 1:A:1517:LEU:O  | 1:A:1520:ILE:N  | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:648:VAL:O   | 1:A:652:PHE:N   | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:1076:GLN:O  | 1:A:1080:ASP:N  | 2.24                     | 0.60              |
| 1:A:2619:SER:O  | 1:A:2623:LEU:N  | 2.32                     | 0.60              |
| 1:A:2774:VAL:C  | 1:A:2776:ILE:N  | 2.60                     | 0.60              |
| 1:A:2774:VAL:CB | 1:A:2877:LEU:HA | 2.32                     | 0.60              |
| 1:A:1258:HIS:O  | 1:A:1261:ILE:N  | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:1615:LYS:O  | 1:A:1619:ARG:N  | 2.35                     | 0.60              |
| 1:A:2465:LYS:O  | 1:A:2469:ASN:N  | 2.22                     | 0.60              |
| 1:A:1134:MET:O  | 1:A:1137:SER:N  | 2.34                     | 0.60              |
| 1:A:65:GLN:O    | 1:A:69:GLN:N    | 2.35                     | 0.60              |
| 1:A:702:LEU:O   | 1:A:706:SER:N   | 2.35                     | 0.59              |
| 1:A:1000:ASN:O  | 1:A:1003:GLN:N  | 2.32                     | 0.59              |
| 1:A:1250:SER:C  | 1:A:1253:LYS:H  | 2.06                     | 0.59              |
| 1:A:1260:VAL:O  | 1:A:1264:HIS:N  | 2.24                     | 0.59              |
| 1:A:1497:LEU:O  | 1:A:1501:VAL:N  | 2.26                     | 0.59              |
| 1:A:1676:GLY:O  | 1:A:1679:GLY:N  | 2.35                     | 0.59              |
| 1:A:655:THR:O   | 1:A:658:ASP:N   | 2.36                     | 0.59              |
| 1:A:1295:LEU:O  | 1:A:1298:PHE:N  | 2.29                     | 0.59              |
| 1:A:1597:PHE:O  | 1:A:1601:SER:N  | 2.18                     | 0.59              |
| 1:A:1869:PHE:O  | 1:A:1873:CYS:N  | 2.33                     | 0.59              |
| 1:A:10:ILE:O    | 1:A:14:GLN:N    | 2.36                     | 0.59              |
| 1:A:14:GLN:O    | 1:A:18:ASP:N    | 2.35                     | 0.59              |
| 1:A:1457:LEU:O  | 1:A:1460:ALA:N  | 2.34                     | 0.59              |
| 1:A:1579:GLN:O  | 1:A:1583:TYR:N  | 2.36                     | 0.59              |
| 1:A:2692:LEU:HA | 1:A:2701:ILE:N  | 2.16                     | 0.59              |
| 1:A:1080:ASP:O  | 1:A:1083:HIS:N  | 2.36                     | 0.59              |
| 1:A:503:GLU:O   | 1:A:507:LEU:N   | 2.24                     | 0.59              |
| 1:A:2761:SER:N  | 1:A:2764:SER:O  | 2.35                     | 0.59              |
| 1:A:2879:ASN:O  | 1:A:2883:ALA:N  | 2.35                     | 0.59              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:680:PHE:O   | 1:A:684:GLN:N    | 2.32                     | 0.59              |
| 1:A:2108:GLN:O  | 1:A:2112:CYS:N   | 2.35                     | 0.59              |
| 1:A:2841:ASP:O  | 1:A:2843:ALA:N   | 2.36                     | 0.59              |
| 1:A:2893:ALA:H  | 1:A:2896:GLN:CB  | 2.15                     | 0.59              |
| 1:A:978:SER:O   | 1:A:982:ARG:N    | 2.25                     | 0.59              |
| 1:A:2342:GLY:O  | 1:A:2346:ALA:N   | 2.26                     | 0.59              |
| 1:A:2449:GLU:N  | 1:A:2452:LEU:H   | 1.99                     | 0.59              |
| 1:A:2491:TRP:O  | 1:A:2495:SER:N   | 2.36                     | 0.59              |
| 1:A:2998:ILE:N  | 1:A:3001:SER:H   | 2.01                     | 0.59              |
| 1:A:3020:VAL:CB | 1:A:3024:THR:H   | 2.16                     | 0.58              |
| 1:A:1110:ALA:O  | 1:A:1114:LYS:N   | 2.36                     | 0.58              |
| 1:A:1016:GLY:O  | 1:A:1019:LEU:N   | 2.37                     | 0.58              |
| 1:A:231:HIS:O   | 1:A:235:ALA:N    | 2.21                     | 0.58              |
| 1:A:1044:ASN:O  | 1:A:1048:THR:N   | 2.25                     | 0.58              |
| 1:A:1112:PRO:HA | 1:A:1116:GLN:CB  | 2.33                     | 0.58              |
| 1:A:2337:CYS:O  | 1:A:2341:CYS:N   | 2.30                     | 0.58              |
| 1:A:712:SER:O   | 1:A:716:VAL:N    | 2.24                     | 0.58              |
| 1:A:2198:LEU:O  | 1:A:2202:TYR:N   | 2.21                     | 0.58              |
| 1:A:251:VAL:O   | 1:A:254:LEU:N    | 2.36                     | 0.58              |
| 1:A:3035:LEU:O  | 1:A:3039:ALA:N   | 2.23                     | 0.58              |
| 1:A:1134:MET:O  | 1:A:1138:ALA:N   | 2.34                     | 0.58              |
| 1:A:1418:ILE:O  | 1:A:1421:ALA:HB3 | 2.03                     | 0.58              |
| 1:A:167:LEU:O   | 1:A:170:VAL:N    | 2.37                     | 0.58              |
| 1:A:2356:ILE:O  | 1:A:2360:TYR:N   | 2.37                     | 0.58              |
| 1:A:655:THR:O   | 1:A:659:LYS:N    | 2.36                     | 0.58              |
| 1:A:2923:VAL:O  | 1:A:2927:PHE:N   | 2.30                     | 0.58              |
| 1:A:2958:PHE:O  | 1:A:2961:THR:N   | 2.37                     | 0.58              |
| 1:A:661:ASP:O   | 1:A:664:THR:N    | 2.37                     | 0.57              |
| 1:A:729:TYR:O   | 1:A:733:GLY:HA3  | 2.04                     | 0.57              |
| 1:A:2958:PHE:HA | 1:A:2961:THR:H   | 1.67                     | 0.57              |
| 1:A:502:ALA:O   | 1:A:506:GLY:N    | 2.25                     | 0.57              |
| 1:A:265:ILE:O   | 1:A:269:HIS:N    | 2.21                     | 0.57              |
| 1:A:1537:GLN:O  | 1:A:1541:LEU:N   | 2.32                     | 0.57              |
| 1:A:1876:HIS:O  | 1:A:1880:THR:N   | 2.23                     | 0.57              |
| 1:A:2206:GLN:O  | 1:A:2210:GLN:N   | 2.25                     | 0.57              |
| 1:A:2687:LYS:N  | 1:A:2703:ASP:O   | 2.37                     | 0.57              |
| 1:A:412:TRP:O   | 1:A:415:ILE:N    | 2.38                     | 0.57              |
| 1:A:147:LYS:O   | 1:A:151:SER:N    | 2.37                     | 0.57              |
| 1:A:500:ILE:O   | 1:A:504:ASN:N    | 2.23                     | 0.57              |
| 1:A:1170:LYS:O  | 1:A:1173:LEU:N   | 2.38                     | 0.57              |
| 1:A:156:TRP:HA  | 1:A:828:LYS:O    | 2.05                     | 0.57              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1375:ALA:O  | 1:A:1378:PRO:N   | 2.38                     | 0.57              |
| 1:A:2782:ASN:HA | 1:A:2785:ASP:CB  | 2.34                     | 0.57              |
| 1:A:1462:ALA:O  | 1:A:1466:ARG:N   | 2.33                     | 0.57              |
| 1:A:462:VAL:O   | 1:A:466:GLN:N    | 2.31                     | 0.57              |
| 1:A:17:HIS:HA   | 1:A:22:GLU:HA    | 1.87                     | 0.56              |
| 1:A:1053:ASP:CB | 1:A:1057:LYS:H   | 2.18                     | 0.56              |
| 1:A:1557:ILE:O  | 1:A:1560:LYS:N   | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:105:ILE:HA  | 1:A:108:ALA:HB3  | 1.86                     | 0.56              |
| 1:A:949:MET:O   | 1:A:952:LYS:N    | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:1115:LEU:O  | 1:A:1118:THR:N   | 2.39                     | 0.56              |
| 1:A:1296:PRO:C  | 1:A:1298:PHE:N   | 2.60                     | 0.56              |
| 1:A:1394:SER:O  | 1:A:1395:ASN:N   | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:1469:ILE:O  | 1:A:1472:LEU:N   | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:1825:GLN:O  | 1:A:1828:LYS:N   | 2.37                     | 0.56              |
| 1:A:2298:VAL:HA | 1:A:2302:LYS:H   | 1.71                     | 0.56              |
| 1:A:2386:ALA:O  | 1:A:2389:SER:N   | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:1256:ILE:O  | 1:A:1259:LEU:N   | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:651:LEU:O   | 1:A:654:GLN:N    | 2.34                     | 0.56              |
| 1:A:883:ASN:O   | 1:A:887:GLU:N    | 2.26                     | 0.56              |
| 1:A:1453:ILE:HA | 1:A:1457:LEU:N   | 2.20                     | 0.56              |
| 1:A:555:VAL:O   | 1:A:559:ILE:N    | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:2504:MET:O  | 1:A:2508:GLY:N   | 2.38                     | 0.56              |
| 1:A:2924:GLU:C  | 1:A:2928:ARG:H   | 2.13                     | 0.56              |
| 1:A:2950:GLU:C  | 1:A:2953:LEU:H   | 2.13                     | 0.56              |
| 1:A:703:ASN:HA  | 1:A:706:SER:CB   | 2.36                     | 0.56              |
| 1:A:856:ASN:O   | 1:A:860:ASP:N    | 2.39                     | 0.56              |
| 1:A:1440:LYS:O  | 1:A:1443:HIS:N   | 2.39                     | 0.56              |
| 1:A:1825:GLN:O  | 1:A:1829:PRO:N   | 2.39                     | 0.56              |
| 1:A:2365:VAL:O  | 1:A:2369:GLY:N   | 2.39                     | 0.56              |
| 1:A:2601:ALA:O  | 1:A:2605:ILE:N   | 2.27                     | 0.56              |
| 1:A:715:LEU:O   | 1:A:719:SER:N    | 2.35                     | 0.55              |
| 1:A:1140:ASN:O  | 1:A:1145:ASP:N   | 2.39                     | 0.55              |
| 1:A:1166:PRO:O  | 1:A:1169:GLU:N   | 2.40                     | 0.55              |
| 1:A:1609:THR:O  | 1:A:1612:GLU:N   | 2.39                     | 0.55              |
| 1:A:2074:CYS:O  | 1:A:2078:SER:N   | 2.25                     | 0.55              |
| 1:A:2075:HIS:O  | 1:A:2079:VAL:N   | 2.31                     | 0.55              |
| 1:A:318:LEU:O   | 1:A:321:ASN:N    | 2.39                     | 0.55              |
| 1:A:2100:TYR:HA | 1:A:2103:ALA:HB3 | 1.88                     | 0.55              |
| 1:A:2126:GLU:O  | 1:A:2130:ASN:N   | 2.21                     | 0.55              |
| 1:A:2173:LEU:O  | 1:A:2177:GLN:N   | 2.18                     | 0.55              |
| 1:A:3008:ARG:O  | 1:A:3012:ARG:N   | 2.24                     | 0.55              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:277:GLU:O   | 1:A:281:GLU:N   | 2.37                     | 0.55              |
| 1:A:1453:ILE:CB | 1:A:1458:GLY:H  | 2.20                     | 0.55              |
| 1:A:1489:ARG:O  | 1:A:1493:LEU:N  | 2.24                     | 0.55              |
| 1:A:1595:ASN:O  | 1:A:1599:SER:N  | 2.22                     | 0.55              |
| 1:A:1746:GLY:C  | 1:A:1749:PHE:H  | 2.14                     | 0.55              |
| 1:A:2734:MET:O  | 1:A:2738:LEU:N  | 2.26                     | 0.55              |
| 1:A:71:GLU:HA   | 1:A:75:LEU:H    | 1.72                     | 0.55              |
| 1:A:1114:LYS:O  | 1:A:1118:THR:N  | 2.34                     | 0.55              |
| 1:A:1417:LYS:O  | 1:A:1420:LEU:N  | 2.40                     | 0.55              |
| 1:A:1447:SER:O  | 1:A:1449:LEU:N  | 2.40                     | 0.55              |
| 1:A:2725:ASP:O  | 1:A:2728:MET:N  | 2.40                     | 0.55              |
| 1:A:2896:GLN:O  | 1:A:2899:ILE:N  | 2.35                     | 0.55              |
| 1:A:2650:ASP:H  | 1:A:2689:GLU:HA | 1.72                     | 0.55              |
| 1:A:2216:ASP:O  | 1:A:2220:GLN:N  | 2.25                     | 0.54              |
| 1:A:2878:ILE:HA | 1:A:2886:VAL:H  | 1.71                     | 0.54              |
| 1:A:2960:TRP:C  | 1:A:2962:MET:H  | 2.15                     | 0.54              |
| 1:A:954:LEU:O   | 1:A:957:GLU:N   | 2.41                     | 0.54              |
| 1:A:2082:LYS:O  | 1:A:2086:TYR:N  | 2.37                     | 0.54              |
| 1:A:609:GLU:O   | 1:A:613:VAL:N   | 2.25                     | 0.54              |
| 1:A:65:GLN:HA   | 1:A:69:GLN:H    | 1.72                     | 0.54              |
| 1:A:1940:GLU:O  | 1:A:1943:LYS:N  | 2.40                     | 0.54              |
| 1:A:2544:LEU:O  | 1:A:2548:ILE:N  | 2.25                     | 0.54              |
| 1:A:1592:GLU:O  | 1:A:1596:HIS:N  | 2.24                     | 0.54              |
| 1:A:2294:GLU:O  | 1:A:2297:GLN:N  | 2.39                     | 0.54              |
| 1:A:958:GLU:O   | 1:A:961:LEU:N   | 2.40                     | 0.54              |
| 1:A:1600:VAL:O  | 1:A:1603:TYR:N  | 2.39                     | 0.54              |
| 1:A:954:LEU:O   | 1:A:958:GLU:N   | 2.40                     | 0.54              |
| 1:A:1041:ALA:C  | 1:A:1043:VAL:N  | 2.66                     | 0.54              |
| 1:A:1398:LYS:HA | 1:A:1513:LEU:H  | 1.73                     | 0.54              |
| 1:A:1849:ILE:O  | 1:A:1852:GLN:N  | 2.41                     | 0.54              |
| 1:A:2393:PHE:O  | 1:A:2397:GLN:N  | 2.31                     | 0.54              |
| 1:A:2746:ARG:C  | 1:A:2749:LYS:H  | 2.15                     | 0.54              |
| 1:A:2927:PHE:O  | 1:A:2930:CYS:N  | 2.41                     | 0.54              |
| 1:A:1536:LYS:O  | 1:A:1540:ASP:N  | 2.26                     | 0.54              |
| 1:A:8:LEU:O     | 1:A:12:CYS:N    | 2.24                     | 0.53              |
| 1:A:882:ILE:O   | 1:A:886:ALA:N   | 2.25                     | 0.53              |
| 1:A:1079:ALA:O  | 1:A:1083:HIS:N  | 2.28                     | 0.53              |
| 1:A:3033:ASN:O  | 1:A:3037:GLN:N  | 2.21                     | 0.53              |
| 1:A:74:CYS:O    | 1:A:78:ALA:N    | 2.37                     | 0.53              |
| 1:A:977:CYS:O   | 1:A:980:TYR:N   | 2.41                     | 0.53              |
| 1:A:2513:THR:O  | 1:A:2517:LEU:N  | 2.34                     | 0.53              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:522:GLU:HA  | 1:A:557:MET:CB   | 2.38                     | 0.53              |
| 1:A:1716:THR:O  | 1:A:1720:ASN:N   | 2.28                     | 0.53              |
| 1:A:1909:MET:O  | 1:A:1913:VAL:N   | 2.30                     | 0.53              |
| 1:A:2099:HIS:O  | 1:A:2103:ALA:N   | 2.40                     | 0.53              |
| 1:A:737:GLU:O   | 1:A:742:LYS:N    | 2.41                     | 0.53              |
| 1:A:1293:ASN:O  | 1:A:1295:LEU:N   | 2.42                     | 0.53              |
| 1:A:2924:GLU:CA | 1:A:2928:ARG:H   | 2.22                     | 0.53              |
| 1:A:1570:VAL:O  | 1:A:1574:LEU:N   | 2.26                     | 0.53              |
| 1:A:1959:GLU:O  | 1:A:1962:ALA:HB3 | 2.08                     | 0.53              |
| 1:A:2259:SER:O  | 1:A:2263:ARG:N   | 2.32                     | 0.53              |
| 1:A:2737:THR:O  | 1:A:2740:GLN:N   | 2.41                     | 0.53              |
| 1:A:1682:ASP:O  | 1:A:1686:ILE:N   | 2.42                     | 0.53              |
| 1:A:2854:ARG:O  | 1:A:2857:ALA:N   | 2.42                     | 0.53              |
| 1:A:485:ASN:O   | 1:A:489:CYS:N    | 2.41                     | 0.53              |
| 1:A:2851:ALA:O  | 1:A:2856:VAL:N   | 2.33                     | 0.53              |
| 1:A:879:ILE:O   | 1:A:883:ASN:N    | 2.28                     | 0.53              |
| 1:A:1479:ARG:O  | 1:A:1484:MET:N   | 2.42                     | 0.53              |
| 1:A:749:ALA:O   | 1:A:752:LEU:N    | 2.42                     | 0.52              |
| 1:A:2152:VAL:O  | 1:A:2155:VAL:N   | 2.41                     | 0.52              |
| 1:A:2408:SER:O  | 1:A:2411:GLU:N   | 2.42                     | 0.52              |
| 1:A:951:LEU:O   | 1:A:954:LEU:N    | 2.42                     | 0.52              |
| 1:A:1606:LEU:C  | 1:A:1608:LEU:N   | 2.53                     | 0.52              |
| 1:A:1609:THR:O  | 1:A:1613:GLY:N   | 2.42                     | 0.52              |
| 1:A:1719:ASN:O  | 1:A:1722:LEU:N   | 2.41                     | 0.52              |
| 1:A:2775:PRO:O  | 1:A:2778:GLU:N   | 2.43                     | 0.52              |
| 1:A:2816:LYS:O  | 1:A:2819:VAL:N   | 2.42                     | 0.52              |
| 1:A:1531:GLN:C  | 1:A:1533:GLU:N   | 2.66                     | 0.52              |
| 1:A:1137:SER:C  | 1:A:1140:ASN:H   | 2.17                     | 0.52              |
| 1:A:526:LEU:O   | 1:A:530:SER:N    | 2.32                     | 0.52              |
| 1:A:1166:PRO:HA | 1:A:1169:GLU:CB  | 2.40                     | 0.52              |
| 1:A:1746:GLY:O  | 1:A:1749:PHE:N   | 2.36                     | 0.52              |
| 1:A:1878:SER:O  | 1:A:1881:SER:N   | 2.43                     | 0.52              |
| 1:A:2196:ARG:O  | 1:A:2200:GLU:N   | 2.24                     | 0.52              |
| 1:A:59:ALA:O    | 1:A:63:PHE:N     | 2.24                     | 0.52              |
| 1:A:1842:LEU:O  | 1:A:1845:LEU:N   | 2.42                     | 0.52              |
| 1:A:2946:LEU:O  | 1:A:2950:GLU:N   | 2.23                     | 0.52              |
| 1:A:703:ASN:O   | 1:A:706:SER:N    | 2.43                     | 0.52              |
| 1:A:1110:ALA:HA | 1:A:1114:LYS:H   | 1.74                     | 0.52              |
| 1:A:1524:LEU:HA | 1:A:1527:LEU:CB  | 2.39                     | 0.52              |
| 1:A:1857:SER:HA | 1:A:1860:ASN:CB  | 2.39                     | 0.52              |
| 1:A:2480:HIS:O  | 1:A:2482:MET:N   | 2.43                     | 0.52              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1000:ASN:O  | 1:A:1004:SER:N  | 2.43                     | 0.52              |
| 1:A:1863:SER:O  | 1:A:1867:GLN:N  | 2.28                     | 0.52              |
| 1:A:1149:ASN:O  | 1:A:1152:SER:N  | 2.43                     | 0.52              |
| 1:A:1238:LEU:O  | 1:A:1242:THR:N  | 2.28                     | 0.52              |
| 1:A:1927:ILE:O  | 1:A:1931:ALA:N  | 2.30                     | 0.52              |
| 1:A:2263:ARG:O  | 1:A:2266:LYS:N  | 2.43                     | 0.52              |
| 1:A:754:GLN:O   | 1:A:758:GLU:N   | 2.34                     | 0.51              |
| 1:A:1527:LEU:C  | 1:A:1529:TYR:N  | 2.65                     | 0.51              |
| 1:A:71:GLU:O    | 1:A:75:LEU:N    | 2.44                     | 0.51              |
| 1:A:1540:ASP:O  | 1:A:1543:LYS:N  | 2.35                     | 0.51              |
| 1:A:755:CYS:O   | 1:A:759:SER:N   | 2.44                     | 0.51              |
| 1:A:1237:ILE:O  | 1:A:1240:ASN:N  | 2.44                     | 0.51              |
| 1:A:2305:GLN:O  | 1:A:2307:LEU:N  | 2.43                     | 0.51              |
| 1:A:2860:SER:C  | 1:A:2863:GLY:H  | 2.17                     | 0.51              |
| 1:A:43:LEU:HA   | 1:A:60:VAL:H    | 1.74                     | 0.51              |
| 1:A:968:GLU:O   | 1:A:971:LYS:N   | 2.43                     | 0.51              |
| 1:A:1218:VAL:O  | 1:A:1222:LEU:N  | 2.41                     | 0.51              |
| 1:A:2780:LEU:HA | 1:A:2783:ASN:CB | 2.40                     | 0.51              |
| 1:A:1305:ASP:O  | 1:A:1307:GLY:N  | 2.43                     | 0.51              |
| 1:A:1531:GLN:C  | 1:A:1534:VAL:H  | 2.15                     | 0.51              |
| 1:A:2339:ARG:O  | 1:A:2342:GLY:N  | 2.43                     | 0.51              |
| 1:A:2561:LEU:O  | 1:A:2565:ASN:N  | 2.28                     | 0.51              |
| 1:A:1815:ASP:O  | 1:A:1818:GLY:N  | 2.28                     | 0.51              |
| 1:A:2295:GLU:C  | 1:A:2298:VAL:H  | 2.20                     | 0.51              |
| 1:A:1147:ILE:C  | 1:A:1149:ASN:H  | 2.19                     | 0.50              |
| 1:A:1467:ASP:HA | 1:A:1470:TYR:CB | 2.41                     | 0.50              |
| 1:A:1569:VAL:O  | 1:A:1573:ASP:N  | 2.34                     | 0.50              |
| 1:A:1862:LEU:O  | 1:A:1865:HIS:N  | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:214:SER:O   | 1:A:218:GLN:N   | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:1829:PRO:O  | 1:A:1833:VAL:N  | 2.29                     | 0.50              |
| 1:A:1884:THR:O  | 1:A:1888:ASN:N  | 2.37                     | 0.50              |
| 1:A:2305:GLN:C  | 1:A:2307:LEU:H  | 2.18                     | 0.50              |
| 1:A:2305:GLN:C  | 1:A:2307:LEU:N  | 2.69                     | 0.50              |
| 1:A:2958:PHE:O  | 1:A:2962:MET:N  | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:845:ASN:O   | 1:A:848:GLU:N   | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:1110:ALA:HA | 1:A:1113:LEU:CB | 2.42                     | 0.50              |
| 1:A:2346:ALA:O  | 1:A:2349:CYS:N  | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:2855:SER:CB | 1:A:2885:LEU:H  | 2.23                     | 0.50              |
| 1:A:2873:VAL:C  | 1:A:2876:ILE:H  | 2.19                     | 0.50              |
| 1:A:316:TYR:O   | 1:A:319:LEU:N   | 2.45                     | 0.50              |
| 1:A:1141:PRO:C  | 1:A:1144:LEU:H  | 2.19                     | 0.50              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1514:GLU:O   | 1:A:1517:LEU:N   | 2.45                     | 0.50              |
| 1:A:1536:LYS:HA  | 1:A:1539:LEU:CB  | 2.42                     | 0.50              |
| 1:A:1631:ILE:O   | 1:A:1634:ALA:N   | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:1891:SER:O   | 1:A:1894:GLU:N   | 2.40                     | 0.50              |
| 1:A:2686:PHE:HA  | 1:A:2704:CYS:CA  | 2.34                     | 0.50              |
| 1:A:2832:ARG:HA  | 1:A:2916:ASP:HA  | 1.93                     | 0.50              |
| 1:A:2924:GLU:HA  | 1:A:2928:ARG:H   | 1.76                     | 0.50              |
| 1:A:1426:ALA:HB1 | 1:A:1430:ASN:CB  | 2.42                     | 0.50              |
| 1:A:1462:ALA:O   | 1:A:1465:LEU:N   | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:1555:LEU:O   | 1:A:1558:THR:N   | 2.35                     | 0.50              |
| 1:A:1859:ARG:O   | 1:A:1862:LEU:N   | 2.44                     | 0.50              |
| 1:A:128:VAL:C    | 1:A:130:ASP:H    | 2.20                     | 0.50              |
| 1:A:511:ILE:O    | 1:A:514:GLY:N    | 2.45                     | 0.50              |
| 1:A:1938:TYR:O   | 1:A:1942:ALA:N   | 2.26                     | 0.49              |
| 1:A:2928:ARG:HA  | 1:A:2931:CYS:CB  | 2.42                     | 0.49              |
| 1:A:1940:GLU:O   | 1:A:1944:VAL:N   | 2.35                     | 0.49              |
| 1:A:2155:VAL:O   | 1:A:2159:CYS:N   | 2.24                     | 0.49              |
| 1:A:526:LEU:O    | 1:A:529:GLY:N    | 2.46                     | 0.49              |
| 1:A:658:ASP:O    | 1:A:663:LEU:N    | 2.38                     | 0.49              |
| 1:A:1150:ARG:O   | 1:A:1154:LEU:N   | 2.26                     | 0.49              |
| 1:A:1383:SER:O   | 1:A:1387:LYS:N   | 2.46                     | 0.49              |
| 1:A:1961:TYR:O   | 1:A:1965:LYS:N   | 2.28                     | 0.49              |
| 1:A:2263:ARG:C   | 1:A:2266:LYS:H   | 2.20                     | 0.49              |
| 1:A:242:THR:O    | 1:A:246:ASN:N    | 2.43                     | 0.49              |
| 1:A:274:SER:O    | 1:A:279:ILE:N    | 2.29                     | 0.49              |
| 1:A:1733:ALA:C   | 1:A:1735:THR:H   | 2.20                     | 0.49              |
| 1:A:2463:LEU:HA  | 1:A:2466:ALA:HB3 | 1.93                     | 0.49              |
| 1:A:1488:LEU:O   | 1:A:1492:SER:N   | 2.32                     | 0.49              |
| 1:A:1940:GLU:O   | 1:A:1941:VAL:C   | 2.55                     | 0.49              |
| 1:A:2145:GLU:O   | 1:A:2148:LYS:N   | 2.45                     | 0.49              |
| 1:A:2695:GLY:N   | 1:A:2698:LEU:HA  | 2.27                     | 0.49              |
| 1:A:2720:ASP:H   | 1:A:2763:ARG:C   | 2.15                     | 0.49              |
| 1:A:1054:PRO:O   | 1:A:1055:TYR:C   | 2.56                     | 0.49              |
| 1:A:1430:ASN:O   | 1:A:1433:TYR:N   | 2.46                     | 0.49              |
| 1:A:1519:VAL:O   | 1:A:1521:VAL:N   | 2.46                     | 0.49              |
| 1:A:439:LEU:HA   | 1:A:442:LEU:CB   | 2.43                     | 0.49              |
| 1:A:1303:THR:HA  | 1:A:1306:SER:CB  | 2.42                     | 0.49              |
| 1:A:1353:GLU:O   | 1:A:1356:ASN:N   | 2.36                     | 0.49              |
| 1:A:1712:PHE:O   | 1:A:1714:MET:N   | 2.45                     | 0.49              |
| 1:A:1748:SER:O   | 1:A:1750:TRP:N   | 2.45                     | 0.49              |
| 1:A:2352:ASN:O   | 1:A:2355:VAL:N   | 2.45                     | 0.49              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:147:LYS:HA  | 1:A:150:LEU:CB   | 2.43                     | 0.49              |
| 1:A:2730:GLN:O  | 1:A:2733:GLN:N   | 2.45                     | 0.49              |
| 1:A:3049:PHE:O  | 1:A:3053:LYS:N   | 2.46                     | 0.49              |
| 1:A:413:LEU:O   | 1:A:416:ALA:HB3  | 2.13                     | 0.48              |
| 1:A:943:HIS:CB  | 1:A:946:MET:H    | 2.26                     | 0.48              |
| 1:A:1200:THR:N  | 1:A:1201:PHE:N   | 2.61                     | 0.48              |
| 1:A:1658:ALA:O  | 1:A:1661:HIS:N   | 2.46                     | 0.48              |
| 1:A:1713:ILE:HA | 1:A:1716:THR:H   | 1.78                     | 0.48              |
| 1:A:2365:VAL:HA | 1:A:2368:ALA:HB3 | 1.95                     | 0.48              |
| 1:A:2922:GLY:O  | 1:A:2924:GLU:N   | 2.46                     | 0.48              |
| 1:A:3052:TRP:O  | 1:A:3055:TRP:N   | 2.46                     | 0.48              |
| 1:A:1555:LEU:O  | 1:A:1557:ILE:N   | 2.46                     | 0.48              |
| 1:A:1910:LEU:O  | 1:A:1914:ASP:N   | 2.24                     | 0.48              |
| 1:A:484:TRP:O   | 1:A:488:TRP:N    | 2.32                     | 0.48              |
| 1:A:732:MET:O   | 1:A:735:ILE:N    | 2.40                     | 0.48              |
| 1:A:1955:LEU:O  | 1:A:1958:ALA:HB3 | 2.14                     | 0.48              |
| 1:A:2387:PHE:O  | 1:A:2391:ALA:N   | 2.31                     | 0.48              |
| 1:A:42:HIS:O    | 1:A:59:ALA:N     | 2.40                     | 0.48              |
| 1:A:118:GLN:O   | 1:A:123:TYR:N    | 2.42                     | 0.48              |
| 1:A:1107:LEU:HA | 1:A:1110:ALA:HB3 | 1.94                     | 0.48              |
| 1:A:2131:ALA:O  | 1:A:2135:LEU:N   | 2.46                     | 0.48              |
| 1:A:975:ASN:O   | 1:A:979:LEU:N    | 2.30                     | 0.48              |
| 1:A:1457:LEU:O  | 1:A:1458:GLY:C   | 2.56                     | 0.48              |
| 1:A:1733:ALA:O  | 1:A:1735:THR:N   | 2.47                     | 0.48              |
| 1:A:1749:PHE:O  | 1:A:1752:ILE:N   | 2.47                     | 0.48              |
| 1:A:1115:LEU:O  | 1:A:1116:GLN:C   | 2.55                     | 0.48              |
| 1:A:124:ILE:O   | 1:A:127:THR:N    | 2.27                     | 0.48              |
| 1:A:990:ILE:O   | 1:A:992:ASN:N    | 2.47                     | 0.48              |
| 1:A:2684:GLN:H  | 1:A:2707:SER:N   | 2.11                     | 0.48              |
| 1:A:1058:TRP:O  | 1:A:1059:ALA:C   | 2.53                     | 0.48              |
| 1:A:2386:ALA:O  | 1:A:2387:PHE:C   | 2.56                     | 0.48              |
| 1:A:2505:LYS:O  | 1:A:2508:GLY:N   | 2.45                     | 0.48              |
| 1:A:2535:LEU:HA | 1:A:2539:GLU:H   | 1.78                     | 0.48              |
| 1:A:3013:LEU:HA | 1:A:3016:LYS:CB  | 2.44                     | 0.48              |
| 1:A:215:LYS:HA  | 1:A:218:GLN:CB   | 2.44                     | 0.48              |
| 1:A:963:MET:C   | 1:A:965:ASP:N    | 2.69                     | 0.48              |
| 1:A:1549:ASN:O  | 1:A:1552:ASN:N   | 2.37                     | 0.48              |
| 1:A:2381:ASN:O  | 1:A:2385:LYS:N   | 2.24                     | 0.48              |
| 1:A:2783:ASN:O  | 1:A:2786:GLY:C   | 2.57                     | 0.48              |
| 1:A:3025:VAL:O  | 1:A:3026:LEU:C   | 2.57                     | 0.48              |
| 1:A:646:SER:C   | 1:A:648:VAL:N    | 2.72                     | 0.47              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:687:LYS:O    | 1:A:690:LEU:N    | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:737:GLU:HA   | 1:A:741:TYR:H    | 1.79                     | 0.47              |
| 1:A:2806:MET:C   | 1:A:2813:PHE:HA  | 2.39                     | 0.47              |
| 1:A:2860:SER:O   | 1:A:2863:GLY:N   | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:1394:SER:HA  | 1:A:1395:ASN:CB  | 2.45                     | 0.47              |
| 1:A:2650:ASP:H   | 1:A:2689:GLU:C   | 2.22                     | 0.47              |
| 1:A:2806:MET:O   | 1:A:2816:LYS:N   | 2.32                     | 0.47              |
| 1:A:1303:THR:O   | 1:A:1306:SER:N   | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:1376:PRO:C   | 1:A:1380:HIS:H   | 2.16                     | 0.47              |
| 1:A:1493:LEU:HA  | 1:A:1496:ASP:CB  | 2.45                     | 0.47              |
| 1:A:2683:ILE:O   | 1:A:2685:SER:N   | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:2851:ALA:O   | 1:A:2855:SER:N   | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:196:LYS:HA   | 1:A:200:SER:CB   | 2.44                     | 0.47              |
| 1:A:1489:ARG:HA  | 1:A:1492:SER:CB  | 2.45                     | 0.47              |
| 1:A:43:LEU:N     | 1:A:59:ALA:HB3   | 2.30                     | 0.47              |
| 1:A:727:GLY:HA3  | 1:A:1353:GLU:HA  | 1.97                     | 0.47              |
| 1:A:1239:LEU:O   | 1:A:1240:ASN:C   | 2.58                     | 0.47              |
| 1:A:1259:LEU:HA  | 1:A:1262:ARG:CB  | 2.44                     | 0.47              |
| 1:A:1582:LYS:O   | 1:A:1592:GLU:HA  | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:1135:SER:O   | 1:A:1138:ALA:HB3 | 2.14                     | 0.47              |
| 1:A:118:GLN:CA   | 1:A:122:ASN:H    | 2.27                     | 0.47              |
| 1:A:1010:ASN:O   | 1:A:1012:ARG:N   | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:1122:ASN:O   | 1:A:1123:ALA:C   | 2.57                     | 0.47              |
| 1:A:1158:ILE:O   | 1:A:1161:VAL:N   | 2.39                     | 0.47              |
| 1:A:1365:LEU:C   | 1:A:1367:ASP:N   | 2.73                     | 0.47              |
| 1:A:1527:LEU:O   | 1:A:1530:GLU:N   | 2.34                     | 0.47              |
| 1:A:1762:ALA:O   | 1:A:1765:GLN:N   | 2.48                     | 0.47              |
| 1:A:2306:SER:HA  | 1:A:2310:SER:N   | 2.18                     | 0.47              |
| 1:A:251:VAL:HA   | 1:A:254:LEU:CB   | 2.45                     | 0.47              |
| 1:A:1460:ALA:O   | 1:A:1464:VAL:N   | 2.37                     | 0.47              |
| 1:A:1884:THR:HA  | 1:A:1887:ALA:HB3 | 1.97                     | 0.47              |
| 1:A:2233:ILE:O   | 1:A:2236:GLU:N   | 2.42                     | 0.47              |
| 1:A:2851:ALA:HB1 | 1:A:2884:GLU:HA  | 1.96                     | 0.47              |
| 1:A:1633:ARG:HA  | 1:A:1636:GLN:CB  | 2.44                     | 0.47              |
| 1:A:2878:ILE:CB  | 1:A:2885:LEU:HA  | 2.44                     | 0.47              |
| 1:A:3009:VAL:O   | 1:A:3012:ARG:N   | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:883:ASN:O    | 1:A:886:ALA:HB3  | 2.15                     | 0.47              |
| 1:A:970:LEU:O    | 1:A:973:LEU:N    | 2.47                     | 0.47              |
| 1:A:1166:PRO:O   | 1:A:1170:LYS:N   | 2.43                     | 0.47              |
| 1:A:1394:SER:O   | 1:A:1396:CYS:N   | 2.48                     | 0.47              |
| 1:A:2660:GLU:O   | 1:A:2685:SER:HA  | 2.15                     | 0.47              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2941:SER:O  | 1:A:2942:GLN:C   | 2.58                     | 0.46              |
| 1:A:215:LYS:C   | 1:A:218:GLN:H    | 2.23                     | 0.46              |
| 1:A:540:CYS:O   | 1:A:543:THR:N    | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:1014:ALA:O  | 1:A:1018:PHE:N   | 2.42                     | 0.46              |
| 1:A:274:SER:CA  | 1:A:278:VAL:H    | 2.25                     | 0.46              |
| 1:A:687:LYS:O   | 1:A:691:ASP:N    | 2.41                     | 0.46              |
| 1:A:1426:ALA:CA | 1:A:1430:ASN:H   | 2.27                     | 0.46              |
| 1:A:1495:CYS:O  | 1:A:1498:LEU:N   | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:1705:ASP:O  | 1:A:1708:LEU:N   | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:929:MET:C   | 1:A:932:ASP:H    | 2.23                     | 0.46              |
| 1:A:1256:ILE:O  | 1:A:1260:VAL:N   | 2.40                     | 0.46              |
| 1:A:2461:ARG:O  | 1:A:2464:CYS:N   | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:1997:THR:O  | 1:A:1999:ILE:N   | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:2848:LYS:O  | 1:A:2852:TYR:N   | 2.27                     | 0.46              |
| 1:A:2921:THR:O  | 1:A:2922:GLY:C   | 2.58                     | 0.46              |
| 1:A:65:GLN:CA   | 1:A:69:GLN:H     | 2.28                     | 0.46              |
| 1:A:268:GLN:O   | 1:A:271:LEU:N    | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:1124:TYR:O  | 1:A:1127:ALA:N   | 2.32                     | 0.46              |
| 1:A:1191:LYS:HA | 1:A:1194:LEU:CB  | 2.46                     | 0.46              |
| 1:A:1493:LEU:O  | 1:A:1496:ASP:N   | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:1870:PHE:O  | 1:A:1874:LEU:N   | 2.32                     | 0.46              |
| 1:A:39:THR:O    | 1:A:59:ALA:HB3   | 2.15                     | 0.46              |
| 1:A:74:CYS:O    | 1:A:77:ILE:N     | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:1303:THR:O  | 1:A:1307:GLY:N   | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:459:LEU:O   | 1:A:462:VAL:N    | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:703:ASN:C   | 1:A:706:SER:H    | 2.24                     | 0.46              |
| 1:A:1419:LEU:O  | 1:A:1422:ILE:N   | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:1496:ASP:O  | 1:A:1500:GLN:N   | 2.21                     | 0.46              |
| 1:A:1959:GLU:HA | 1:A:1962:ALA:HB3 | 1.96                     | 0.46              |
| 1:A:2761:SER:C  | 1:A:2764:SER:H   | 2.24                     | 0.46              |
| 1:A:3015:GLU:HA | 1:A:3019:GLY:HA3 | 1.98                     | 0.46              |
| 1:A:755:CYS:O   | 1:A:758:GLU:N    | 2.49                     | 0.46              |
| 1:A:1038:VAL:O  | 1:A:1041:ALA:N   | 2.38                     | 0.46              |
| 1:A:2361:LEU:HA | 1:A:2364:ALA:HB3 | 1.98                     | 0.46              |
| 1:A:2960:TRP:O  | 1:A:2962:MET:N   | 2.48                     | 0.46              |
| 1:A:40:ILE:O    | 1:A:44:ASP:N     | 2.40                     | 0.46              |
| 1:A:43:LEU:HA   | 1:A:59:ALA:C     | 2.40                     | 0.45              |
| 1:A:1045:CYS:O  | 1:A:1048:THR:N   | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:1733:ALA:C  | 1:A:1735:THR:N   | 2.70                     | 0.45              |
| 1:A:2932:GLU:O  | 1:A:2935:MET:N   | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:2967:ALA:O  | 1:A:2970:LEU:N   | 2.49                     | 0.45              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:123:TYR:C    | 1:A:126:ASP:H   | 2.24                     | 0.45              |
| 1:A:857:LEU:O    | 1:A:860:ASP:N   | 2.46                     | 0.45              |
| 1:A:1014:ALA:O   | 1:A:1015:GLN:C  | 2.59                     | 0.45              |
| 1:A:1213:HIS:C   | 1:A:1215:ASP:N  | 2.73                     | 0.45              |
| 1:A:1457:LEU:C   | 1:A:1461:TRP:H  | 2.18                     | 0.45              |
| 1:A:1663:GLY:O   | 1:A:1666:GLU:N  | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:583:TYR:HA   | 1:A:586:GLU:CB  | 2.47                     | 0.45              |
| 1:A:966:VAL:O    | 1:A:969:LEU:N   | 2.29                     | 0.45              |
| 1:A:970:LEU:O    | 1:A:971:LYS:C   | 2.57                     | 0.45              |
| 1:A:1241:TYR:O   | 1:A:1244:ILE:N  | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:1256:ILE:O   | 1:A:1257:PRO:C  | 2.60                     | 0.45              |
| 1:A:2704:CYS:O   | 1:A:2711:GLU:HA | 2.16                     | 0.45              |
| 1:A:2910:LEU:CB  | 1:A:2913:ASP:H  | 2.28                     | 0.45              |
| 1:A:1752:ILE:O   | 1:A:1756:THR:N  | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:2528:GLY:HA3 | 1:A:2599:THR:HA | 1.98                     | 0.45              |
| 1:A:31:LYS:O     | 1:A:34:ILE:N    | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:448:HIS:O    | 1:A:450:GLU:N   | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:1107:LEU:O   | 1:A:1110:ALA:N  | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:1296:PRO:C   | 1:A:1298:PHE:H  | 2.25                     | 0.45              |
| 1:A:1396:CYS:C   | 1:A:1400:LYS:H  | 2.24                     | 0.45              |
| 1:A:2649:ALA:H   | 1:A:2689:GLU:CB | 2.30                     | 0.45              |
| 1:A:251:VAL:C    | 1:A:254:LEU:H   | 2.24                     | 0.45              |
| 1:A:345:LEU:O    | 1:A:348:LEU:N   | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:438:ILE:O    | 1:A:442:LEU:N   | 2.30                     | 0.45              |
| 1:A:735:ILE:O    | 1:A:739:GLU:N   | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:1746:GLY:HA2 | 1:A:1749:PHE:CB | 2.47                     | 0.45              |
| 1:A:1951:HIS:O   | 1:A:1952:PHE:C  | 2.58                     | 0.45              |
| 1:A:2851:ALA:HA  | 1:A:2855:SER:H  | 1.82                     | 0.45              |
| 1:A:3025:VAL:O   | 1:A:3027:SER:HA | 2.17                     | 0.45              |
| 1:A:2535:LEU:O   | 1:A:2540:VAL:N  | 2.37                     | 0.45              |
| 1:A:2745:THR:O   | 1:A:2748:ARG:N  | 2.49                     | 0.45              |
| 1:A:2927:PHE:O   | 1:A:2928:ARG:C  | 2.58                     | 0.45              |
| 1:A:657:PHE:O    | 1:A:660:MET:N   | 2.39                     | 0.45              |
| 1:A:877:SER:O    | 1:A:880:GLY:N   | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:1266:ASP:O   | 1:A:1270:SER:N  | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:2525:ALA:HB1 | 1:A:2956:PRO:CB | 2.47                     | 0.45              |
| 1:A:1082:HIS:O   | 1:A:1085:VAL:N  | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:1958:ALA:O   | 1:A:1959:GLU:C  | 2.59                     | 0.45              |
| 1:A:685:ASN:O    | 1:A:688:GLU:N   | 2.50                     | 0.45              |
| 1:A:1666:GLU:HA  | 1:A:1669:GLU:CB | 2.47                     | 0.45              |
| 1:A:1847:HIS:O   | 1:A:1850:LEU: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:1847:HIS:O  | 1:A:1848:ASP:C   | 2.59                     | 0.45              |
| 1:A:2722:LEU:O  | 1:A:2723:ARG:C   | 2.59                     | 0.45              |
| 1:A:1519:VAL:O  | 1:A:1520:ILE:C   | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:1917:ARG:O  | 1:A:1920:LYS:N   | 2.42                     | 0.44              |
| 1:A:745:LEU:HA  | 1:A:748:LYS:CB   | 2.47                     | 0.44              |
| 1:A:1483:ILE:CB | 1:A:1486:VAL:H   | 2.30                     | 0.44              |
| 1:A:1748:SER:O  | 1:A:1749:PHE:C   | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:2298:VAL:CA | 1:A:2301:ALA:HB3 | 2.44                     | 0.44              |
| 1:A:316:TYR:O   | 1:A:317:ASP:C    | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:1043:VAL:O  | 1:A:1046:LEU:N   | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:1354:PRO:O  | 1:A:1357:SER:N   | 2.51                     | 0.44              |
| 1:A:1864:THR:O  | 1:A:1867:GLN:N   | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:2293:LEU:O  | 1:A:2296:ALA:N   | 2.28                     | 0.44              |
| 1:A:2356:ILE:C  | 1:A:2358:GLN:N   | 2.76                     | 0.44              |
| 1:A:2843:ALA:O  | 1:A:2844:ILE:C   | 2.58                     | 0.44              |
| 1:A:968:GLU:O   | 1:A:969:LEU:C    | 2.60                     | 0.44              |
| 1:A:993:HIS:O   | 1:A:996:HIS:N    | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:1250:SER:O  | 1:A:1251:CYS:C   | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:1560:LYS:O  | 1:A:1564:PRO:N   | 2.49                     | 0.44              |
| 1:A:2684:GLN:CB | 1:A:2707:SER:HA  | 2.47                     | 0.44              |
| 1:A:965:ASP:C   | 1:A:967:LEU:H    | 2.23                     | 0.44              |
| 1:A:1197:VAL:O  | 1:A:1201:PHE:N   | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:2623:LEU:O  | 1:A:2627:TYR:N   | 2.23                     | 0.44              |
| 1:A:2685:SER:O  | 1:A:2705:VAL:N   | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:2872:HIS:O  | 1:A:2876:ILE:N   | 2.49                     | 0.44              |
| 1:A:646:SER:C   | 1:A:648:VAL:H    | 2.24                     | 0.44              |
| 1:A:1469:ILE:O  | 1:A:1470:TYR:C   | 2.58                     | 0.44              |
| 1:A:1878:SER:HA | 1:A:1881:SER:CB  | 2.48                     | 0.44              |
| 1:A:2684:GLN:H  | 1:A:2706:GLY:C   | 2.26                     | 0.44              |
| 1:A:2856:VAL:O  | 1:A:2857:ALA:C   | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:931:ILE:O   | 1:A:933:SER:N    | 2.51                     | 0.44              |
| 1:A:1996:GLU:C  | 1:A:1998:GLY:H   | 2.26                     | 0.44              |
| 1:A:2246:CYS:O  | 1:A:2250:ILE:N   | 2.32                     | 0.44              |
| 1:A:2730:GLN:C  | 1:A:2733:GLN:H   | 2.26                     | 0.44              |
| 1:A:2816:LYS:C  | 1:A:2819:VAL:H   | 2.26                     | 0.44              |
| 1:A:432:LEU:O   | 1:A:436:LEU:N    | 2.39                     | 0.44              |
| 1:A:922:ASP:O   | 1:A:925:ARG:N    | 2.50                     | 0.44              |
| 1:A:1434:LYS:CB | 1:A:1436:HIS:H   | 2.31                     | 0.44              |
| 1:A:1719:ASN:O  | 1:A:1720:ASN:C   | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:2703:ASP:HA | 1:A:2712:ARG:O   | 2.17                     | 0.44              |
| 1:A:2796:PHE:O  | 1:A:2800:GLN:N   | 2.33                     | 0.44              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2806:MET:CA  | 1:A:2813:PHE:HA | 2.48                     | 0.44              |
| 1:A:194:VAL:O    | 1:A:195:THR:C   | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:634:GLU:HA   | 1:A:637:GLN:CB  | 2.48                     | 0.44              |
| 1:A:1016:GLY:O   | 1:A:1017:GLN:C  | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:1495:CYS:O   | 1:A:1496:ASP:C  | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:2212:LEU:O   | 1:A:2213:LYS:C  | 2.61                     | 0.44              |
| 1:A:631:PRO:O    | 1:A:634:GLU:N   | 2.50                     | 0.43              |
| 1:A:2199:SER:O   | 1:A:2200:GLU:C  | 2.60                     | 0.43              |
| 1:A:2958:PHE:CA  | 1:A:2961:THR:H  | 2.31                     | 0.43              |
| 1:A:1078:LEU:O   | 1:A:1081:ASN:N  | 2.51                     | 0.43              |
| 1:A:1110:ALA:O   | 1:A:1113:LEU:N  | 2.51                     | 0.43              |
| 1:A:1630:ASP:O   | 1:A:1632:MET:N  | 2.51                     | 0.43              |
| 1:A:558:GLY:O    | 1:A:559:ILE:C   | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:1484:MET:HA  | 1:A:1487:SER:CB | 2.49                     | 0.43              |
| 1:A:1645:VAL:O   | 1:A:1648:VAL:N  | 2.52                     | 0.43              |
| 1:A:2020:GLY:HA2 | 1:A:2925:GLY:O  | 2.18                     | 0.43              |
| 1:A:2344:TRP:HA  | 1:A:2347:GLU:CB | 2.48                     | 0.43              |
| 1:A:2857:ALA:O   | 1:A:2858:THR:C  | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:1139:GLU:O   | 1:A:1140:ASN:C  | 2.60                     | 0.43              |
| 1:A:1544:TYR:O   | 1:A:1545:LEU:C  | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:1583:TYR:HA  | 1:A:1592:GLU:O  | 2.17                     | 0.43              |
| 1:A:1841:VAL:CB  | 1:A:1844:TYR:H  | 2.32                     | 0.43              |
| 1:A:194:VAL:O    | 1:A:197:GLY:N   | 2.52                     | 0.43              |
| 1:A:720:ARG:C    | 1:A:722:LEU:N   | 2.76                     | 0.43              |
| 1:A:1560:LYS:HA  | 1:A:1563:ASP:CB | 2.48                     | 0.43              |
| 1:A:1609:THR:O   | 1:A:1610:ARG:C  | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:2204:LYS:O   | 1:A:2205:TRP:C  | 2.60                     | 0.43              |
| 1:A:2354:ALA:HA  | 1:A:2357:MET:CB | 2.49                     | 0.43              |
| 1:A:2650:ASP:H   | 1:A:2689:GLU:CA | 2.31                     | 0.43              |
| 1:A:545:ALA:HB1  | 1:A:582:PHE:CB  | 2.48                     | 0.43              |
| 1:A:1170:LYS:O   | 1:A:1174:PHE:N  | 2.51                     | 0.43              |
| 1:A:1517:LEU:O   | 1:A:1521:VAL:N  | 2.49                     | 0.43              |
| 1:A:1762:ALA:O   | 1:A:1763:TYR:C  | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:2391:ALA:O   | 1:A:2392:ARG:C  | 2.62                     | 0.43              |
| 1:A:18:ASP:HA    | 1:A:73:GLU:CA   | 2.46                     | 0.43              |
| 1:A:1856:GLU:O   | 1:A:1857:SER:C  | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:2178:ALA:O   | 1:A:2179:ILE:C  | 2.61                     | 0.43              |
| 1:A:2806:MET:HA  | 1:A:2813:PHE:HA | 2.00                     | 0.43              |
| 1:A:2813:PHE:O   | 1:A:2816:LYS:N  | 2.51                     | 0.43              |
| 1:A:2924:GLU:C   | 1:A:2926:VAL:N  | 2.76                     | 0.43              |
| 1:A:2483:TRP:O   | 1:A:2486:ARG:N  | 2.51                     | 0.43              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2960:TRP:C  | 1:A:2962:MET:N   | 2.74                     | 0.43              |
| 1:A:749:ALA:HA  | 1:A:752:LEU:CB   | 2.49                     | 0.43              |
| 1:A:1066:LYS:O  | 1:A:1068:PHE:N   | 2.52                     | 0.43              |
| 1:A:1134:MET:HA | 1:A:1137:SER:H   | 1.84                     | 0.43              |
| 1:A:1308:MET:O  | 1:A:1311:GLN:O   | 2.37                     | 0.43              |
| 1:A:1415:TYR:O  | 1:A:1416:GLN:C   | 2.62                     | 0.43              |
| 1:A:2732:PHE:O  | 1:A:2733:GLN:C   | 2.62                     | 0.43              |
| 1:A:3036:ILE:O  | 1:A:3040:ILE:N   | 2.52                     | 0.43              |
| 1:A:434:PRO:O   | 1:A:437:MET:N    | 2.52                     | 0.42              |
| 1:A:1075:THR:O  | 1:A:1079:ALA:N   | 2.32                     | 0.42              |
| 1:A:1110:ALA:CA | 1:A:1114:LYS:H   | 2.31                     | 0.42              |
| 1:A:1572:LYS:O  | 1:A:1576:ILE:N   | 2.51                     | 0.42              |
| 1:A:1640:GLN:O  | 1:A:1642:GLY:N   | 2.52                     | 0.42              |
| 1:A:2562:ALA:O  | 1:A:2566:ALA:N   | 2.37                     | 0.42              |
| 1:A:2896:GLN:C  | 1:A:2899:ILE:H   | 2.24                     | 0.42              |
| 1:A:1552:ASN:O  | 1:A:1556:TYR:N   | 2.43                     | 0.42              |
| 1:A:2181:GLU:O  | 1:A:2182:LEU:C   | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:2616:MET:C  | 1:A:2618:ARG:H   | 2.24                     | 0.42              |
| 1:A:2706:GLY:C  | 1:A:2709:GLY:H   | 2.27                     | 0.42              |
| 1:A:2867:GLY:O  | 1:A:2894:PHE:HA  | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:927:LEU:HA  | 1:A:930:LEU:CB   | 2.50                     | 0.42              |
| 1:A:1048:THR:C  | 1:A:1050:LEU:H   | 2.26                     | 0.42              |
| 1:A:1064:MET:O  | 1:A:1065:GLY:C   | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:1377:ASN:HA | 1:A:1381:PHE:H   | 1.83                     | 0.42              |
| 1:A:1453:ILE:HA | 1:A:1457:LEU:H   | 1.84                     | 0.42              |
| 1:A:3032:VAL:O  | 1:A:3033:ASN:C   | 2.61                     | 0.42              |
| 1:A:694:LEU:HA  | 1:A:697:LEU:CB   | 2.50                     | 0.42              |
| 1:A:1633:ARG:O  | 1:A:1637:ASP:N   | 2.51                     | 0.42              |
| 1:A:2617:VAL:C  | 1:A:2619:SER:N   | 2.76                     | 0.42              |
| 1:A:14:GLN:HA   | 1:A:17:HIS:CB    | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:340:ALA:O   | 1:A:344:ASN:N    | 2.30                     | 0.42              |
| 1:A:507:LEU:O   | 1:A:510:ALA:N    | 2.52                     | 0.42              |
| 1:A:1626:ASP:O  | 1:A:1627:GLN:C   | 2.62                     | 0.42              |
| 1:A:1661:HIS:HA | 1:A:1664:GLU:CB  | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:1908:THR:O  | 1:A:1911:ALA:HB3 | 2.19                     | 0.42              |
| 1:A:2366:GLU:C  | 1:A:2369:GLY:H   | 2.27                     | 0.42              |
| 1:A:225:SER:O   | 1:A:228:GLY:N    | 2.52                     | 0.42              |
| 1:A:951:LEU:O   | 1:A:953:GLU:N    | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:1258:HIS:O  | 1:A:1259:LEU:C   | 2.60                     | 0.42              |
| 1:A:1382:PRO:O  | 1:A:1385:VAL:N   | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:2133:GLN:O  | 1:A:2136:ARG:N   | 2.30                     | 0.42              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:2923:VAL:O  | 1:A:2926:VAL:N   | 2.46                     | 0.42              |
| 1:A:242:THR:CB  | 1:A:245:VAL:H    | 2.33                     | 0.42              |
| 1:A:1445:PHE:O  | 1:A:1446:VAL:C   | 2.61                     | 0.42              |
| 1:A:2498:SER:CB | 1:A:2501:ASN:H   | 2.32                     | 0.42              |
| 1:A:2517:LEU:O  | 1:A:2519:LEU:N   | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:1084:GLN:O  | 1:A:1085:VAL:C   | 2.60                     | 0.42              |
| 1:A:1591:LEU:O  | 1:A:1595:ASN:N   | 2.29                     | 0.42              |
| 1:A:1717:TYR:O  | 1:A:1720:ASN:N   | 2.52                     | 0.42              |
| 1:A:2606:ILE:O  | 1:A:2609:ILE:N   | 2.52                     | 0.42              |
| 1:A:2854:ARG:O  | 1:A:2855:SER:C   | 2.61                     | 0.42              |
| 1:A:2912:ARG:O  | 1:A:2913:ASP:C   | 2.61                     | 0.42              |
| 1:A:103:TYR:O   | 1:A:107:CYS:N    | 2.35                     | 0.42              |
| 1:A:972:PRO:O   | 1:A:976:VAL:N    | 2.39                     | 0.42              |
| 1:A:1082:HIS:O  | 1:A:1083:HIS:C   | 2.61                     | 0.42              |
| 1:A:1377:ASN:HA | 1:A:1381:PHE:N   | 2.35                     | 0.42              |
| 1:A:1430:ASN:HA | 1:A:1433:TYR:CB  | 2.50                     | 0.42              |
| 1:A:1519:VAL:C  | 1:A:1521:VAL:N   | 2.74                     | 0.42              |
| 1:A:1743:THR:C  | 1:A:1745:THR:N   | 2.78                     | 0.42              |
| 1:A:2186:GLY:O  | 1:A:2190:SER:N   | 2.49                     | 0.42              |
| 1:A:2930:CYS:O  | 1:A:2933:LYS:N   | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:3027:SER:O  | 1:A:3029:GLY:N   | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:237:THR:O   | 1:A:239:PHE:N    | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:979:LEU:C   | 1:A:981:ARG:N    | 2.77                     | 0.42              |
| 1:A:1745:THR:C  | 1:A:1747:HIS:H   | 2.28                     | 0.42              |
| 1:A:1862:LEU:O  | 1:A:1863:SER:C   | 2.61                     | 0.42              |
| 1:A:1951:HIS:O  | 1:A:1954:ALA:N   | 2.53                     | 0.42              |
| 1:A:843:ASN:CA  | 1:A:846:LEU:H    | 2.29                     | 0.41              |
| 1:A:1120:PHE:O  | 1:A:1121:GLU:C   | 2.60                     | 0.41              |
| 1:A:1131:MET:C  | 1:A:1133:GLU:N   | 2.75                     | 0.41              |
| 1:A:1168:CYS:O  | 1:A:1169:GLU:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:1462:ALA:O  | 1:A:1463:PHE:C   | 2.62                     | 0.41              |
| 1:A:2195:HIS:O  | 1:A:2198:LEU:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:2498:SER:C  | 1:A:2500:VAL:N   | 2.73                     | 0.41              |
| 1:A:1115:LEU:C  | 1:A:1117:GLN:N   | 2.77                     | 0.41              |
| 1:A:1678:VAL:O  | 1:A:1681:ILE:N   | 2.45                     | 0.41              |
| 1:A:2181:GLU:O  | 1:A:2184:SER:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:2209:SER:O  | 1:A:2212:LEU:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:2394:SER:CB | 1:A:2466:ALA:HB2 | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:2607:CYS:HA | 1:A:2610:ARG:CB  | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:2780:LEU:C  | 1:A:2783:ASN:H   | 2.28                     | 0.41              |
| 1:A:1136:HIS:O  | 1:A:1138:ALA:N   | 2.53                     | 0.41              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1           | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|------------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1882:ARG:O   | 1:A:1886:PRO:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:2131:ALA:HA  | 1:A:2134:SER:CB  | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:2222:PRO:O   | 1:A:2225:ALA:HB3 | 2.19                     | 0.41              |
| 1:A:2382:GLY:O   | 1:A:2383:LYS:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:1145:ASP:O   | 1:A:1147:ILE:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:1154:LEU:O   | 1:A:1158:ILE:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:1369:SER:O   | 1:A:1372:LEU:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:1586:GLY:HA3 | 1:A:1592:GLU:H   | 1.85                     | 0.41              |
| 1:A:1217:LEU:C   | 1:A:1219:LEU:N   | 2.74                     | 0.41              |
| 1:A:1911:ALA:O   | 1:A:1914:ASP:N   | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:461:GLU:O    | 1:A:462:VAL:C    | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:1540:ASP:O   | 1:A:1541:LEU:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:1571:PHE:O   | 1:A:1572:LYS:C   | 2.61                     | 0.41              |
| 1:A:1715:LEU:O   | 1:A:1718:LEU:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:2015:PRO:HA  | 1:A:2018:LEU:CB  | 2.51                     | 0.41              |
| 1:A:2170:TYR:O   | 1:A:2171:PRO:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:2480:HIS:C   | 1:A:2482:MET:N   | 2.79                     | 0.41              |
| 1:A:2541:LEU:O   | 1:A:2542:ASN:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:285:LEU:HA   | 1:A:288:TYR:CB   | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:314:ASN:O    | 1:A:317:ASP:N    | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:1447:SER:O   | 1:A:1448:LEU:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:1722:LEU:O   | 1:A:1725:ASP:N   | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:1731:SER:O   | 1:A:1733:ALA:N   | 2.53                     | 0.41              |
| 1:A:2463:LEU:O   | 1:A:2464:CYS:C   | 2.62                     | 0.41              |
| 1:A:2943:GLU:O   | 1:A:2944:THR:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:110:ARG:O    | 1:A:112:ALA:N    | 2.43                     | 0.41              |
| 1:A:1045:CYS:O   | 1:A:1046:LEU:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:1438:ILE:O   | 1:A:1439:LEU:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:1637:ASP:O   | 1:A:1640:GLN:N   | 2.52                     | 0.41              |
| 1:A:2275:ILE:HA  | 1:A:2278:ILE:CB  | 2.50                     | 0.41              |
| 1:A:2343:ASN:HA  | 1:A:2346:ALA:HB3 | 2.01                     | 0.41              |
| 1:A:2403:ASN:HA  | 1:A:2407:SER:H   | 1.84                     | 0.41              |
| 1:A:2490:LEU:O   | 1:A:2493:GLU:N   | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:71:GLU:O     | 1:A:74:CYS:N     | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:525:LYS:O    | 1:A:529:GLY:N    | 2.45                     | 0.41              |
| 1:A:1136:HIS:C   | 1:A:1138:ALA:N   | 2.78                     | 0.41              |
| 1:A:1155:LEU:O   | 1:A:1156:THR:C   | 2.62                     | 0.41              |
| 1:A:1165:SER:O   | 1:A:1169:GLU:N   | 2.48                     | 0.41              |
| 1:A:1243:ASN:O   | 1:A:1244:ILE:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:1255:LEU:O   | 1:A:1256:ILE:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:1458:GLY:O   | 1:A:1459:GLY:C   | 2.63                     | 0.41              |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Atom-1          | Atom-2           | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|-----------------|------------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1490:SER:O  | 1:A:1491:PHE:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:1812:ALA:O  | 1:A:1815:ASP:N   | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:2220:GLN:O  | 1:A:2221:GLU:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:2481:ASP:O  | 1:A:2482:MET:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:2847:GLU:O  | 1:A:2848:LYS:C   | 2.62                     | 0.41              |
| 1:A:1056:SER:CB | 1:A:1059:ALA:HB2 | 2.51                     | 0.41              |
| 1:A:1153:VAL:O  | 1:A:1154:LEU:C   | 2.59                     | 0.41              |
| 1:A:1278:ASP:O  | 1:A:1281:SER:N   | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:1283:LEU:C  | 1:A:1285:ASP:H   | 2.29                     | 0.41              |
| 1:A:1746:GLY:O  | 1:A:1747:HIS:C   | 2.63                     | 0.41              |
| 1:A:1864:THR:O  | 1:A:1865:HIS:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:2298:VAL:HA | 1:A:2302:LYS:N   | 2.35                     | 0.41              |
| 1:A:2384:MET:C  | 1:A:2386:ALA:N   | 2.79                     | 0.41              |
| 1:A:2498:SER:O  | 1:A:2501:ASN:N   | 2.54                     | 0.41              |
| 1:A:2565:ASN:O  | 1:A:2566:ALA:C   | 2.64                     | 0.41              |
| 1:A:2798:ALA:HA | 1:A:2801:CYS:CB  | 2.51                     | 0.41              |
| 1:A:338:ASN:C   | 1:A:340:ALA:H    | 2.28                     | 0.40              |
| 1:A:951:LEU:C   | 1:A:953:GLU:N    | 2.75                     | 0.40              |
| 1:A:1055:TYR:O  | 1:A:1056:SER:C   | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:1147:ILE:C  | 1:A:1149:ASN:N   | 2.79                     | 0.40              |
| 1:A:1442:TYR:O  | 1:A:1443:HIS:C   | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:1478:GLN:C  | 1:A:1481:SER:H   | 2.29                     | 0.40              |
| 1:A:1763:TYR:O  | 1:A:1764:LEU:C   | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:1866:VAL:O  | 1:A:1867:GLN:C   | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:1884:THR:O  | 1:A:1885:THR:C   | 2.65                     | 0.40              |
| 1:A:2553:PRO:O  | 1:A:2556:THR:N   | 2.53                     | 0.40              |
| 1:A:2841:ASP:O  | 1:A:2844:ILE:N   | 2.53                     | 0.40              |
| 1:A:530:SER:HA  | 1:A:533:ARG:C    | 2.46                     | 0.40              |
| 1:A:694:LEU:O   | 1:A:697:LEU:N    | 2.55                     | 0.40              |
| 1:A:997:VAL:O   | 1:A:998:VAL:C    | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:1146:GLU:O  | 1:A:1149:ASN:N   | 2.54                     | 0.40              |
| 1:A:1412:PRO:C  | 1:A:1415:TYR:H   | 2.29                     | 0.40              |
| 1:A:1464:VAL:O  | 1:A:1465:LEU:C   | 2.62                     | 0.40              |
| 1:A:1663:GLY:O  | 1:A:1664:GLU:C   | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:2100:TYR:HA | 1:A:2103:ALA:CB  | 2.51                     | 0.40              |
| 1:A:2461:ARG:O  | 1:A:2462:PHE:C   | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:2516:PHE:O  | 1:A:2517:LEU:C   | 2.65                     | 0.40              |
| 1:A:2950:GLU:O  | 1:A:2951:VAL:C   | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:747:GLN:O   | 1:A:748:LYS:C    | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:958:GLU:O   | 1:A:959:TYR:C    | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:1151:LYS:O  | 1:A:1152:SER:C   | 2.62                     | 0.40              |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Atom-1         | Atom-2          | Interatomic distance (Å) | Clash overlap (Å) |
|----------------|-----------------|--------------------------|-------------------|
| 1:A:1816:SER:C | 1:A:1818:GLY:N  | 2.79                     | 0.40              |
| 1:A:2490:LEU:O | 1:A:2491:TRP:C  | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:228:GLY:O  | 1:A:231:HIS:N   | 2.51                     | 0.40              |
| 1:A:1080:ASP:O | 1:A:1081:ASN:C  | 2.62                     | 0.40              |
| 1:A:1109:LYS:O | 1:A:1110:ALA:C  | 2.63                     | 0.40              |
| 1:A:1239:LEU:O | 1:A:1242:THR:N  | 2.55                     | 0.40              |
| 1:A:1429:THR:O | 1:A:1433:TYR:N  | 2.37                     | 0.40              |
| 1:A:1942:ALA:O | 1:A:1943:LYS:C  | 2.65                     | 0.40              |
| 1:A:2152:VAL:O | 1:A:2153:LYS:C  | 2.62                     | 0.40              |
| 1:A:2207:LYS:O | 1:A:2211:LEU:N  | 2.30                     | 0.40              |
| 1:A:2774:VAL:H | 1:A:2877:LEU:CA | 2.21                     | 0.40              |
| 1:A:2967:ALA:O | 1:A:2968:LEU:C  | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:3009:VAL:O | 1:A:3010:LEU:C  | 2.64                     | 0.40              |
| 1:A:1660:ASN:O | 1:A:1661:HIS:C  | 2.61                     | 0.40              |
| 1:A:1822:GLU:O | 1:A:1825:GLN:N  | 2.55                     | 0.40              |
| 1:A:1907:ARG:O | 1:A:1910:LEU:N  | 2.55                     | 0.40              |
| 1:A:3024:THR:O | 1:A:3025:VAL:C  | 2.65                     | 0.40              |

There are no symmetry-related clashes.

## 5.3 Torsion angles ⓘ

### 5.3.1 Protein backbone ⓘ

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

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

| Mol | Chain | Analysed        | Favoured   | Allowed  | Outliers | Percentiles |
|-----|-------|-----------------|------------|----------|----------|-------------|
| 1   | A     | 2368/3066 (77%) | 2142 (90%) | 218 (9%) | 8 (0%)   | 36 72       |

All (8) Ramachandran outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res  | Type |
|-----|-------|------|------|
| 1   | A     | 2776 | ILE  |
| 1   | A     | 1607 | PRO  |
| 1   | A     | 2645 | ILE  |
| 1   | A     | 1367 | ASP  |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Mol | Chain | Res  | Type |
|-----|-------|------|------|
| 1   | A     | 1688 | ILE  |
| 1   | A     | 1369 | SER  |
| 1   | A     | 1353 | GLU  |
| 1   | A     | 2166 | VAL  |

### 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](#)

There are no ligands in this entry.

## 5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

## 5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

| Mol | Chain | Number of breaks |
|-----|-------|------------------|
| 1   | A     | 4                |

All chain breaks are listed below:

| Model | Chain | Residue-1 | Atom-1 | Residue-2 | Atom-2 | Distance (Å) |
|-------|-------|-----------|--------|-----------|--------|--------------|
| 1     | A     | 128:VAL   | C      | 129:LYS   | N      | 3.85         |
| 1     | A     | 1200:THR  | C      | 1201:PHE  | N      | 3.19         |
| 1     | A     | 163:GLN   | C      | 164:TRP   | N      | 3.09         |
| 1     | A     | 1394:SER  | C      | 1395:ASN  | N      | 3.08         |

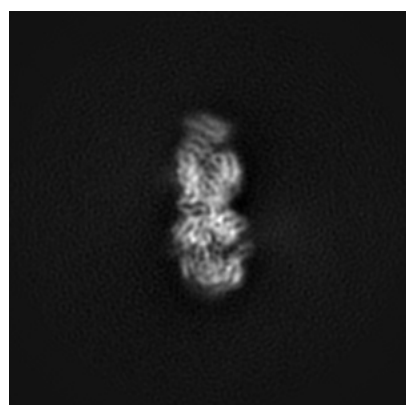
## 6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-3672. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

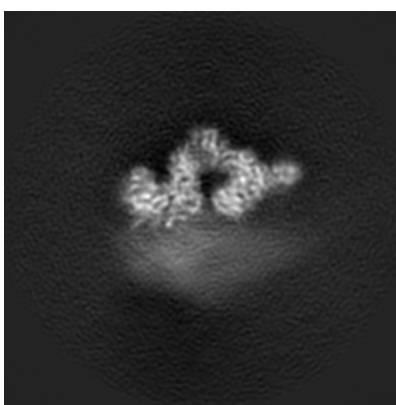
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

### 6.1 Orthogonal projections [i](#)

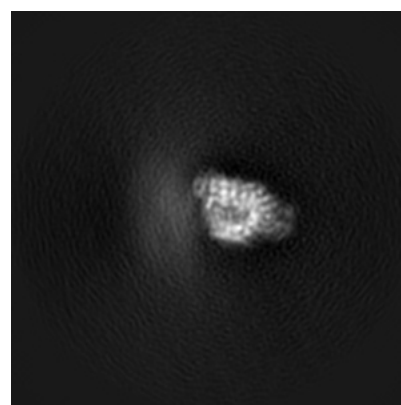
#### 6.1.1 Primary map



X



Y

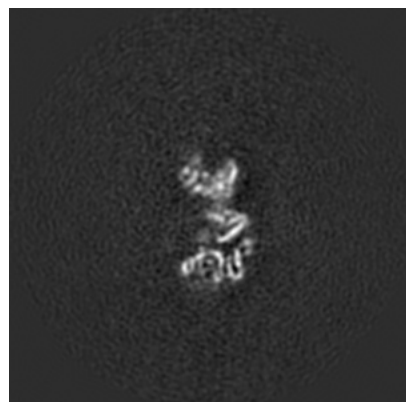


Z

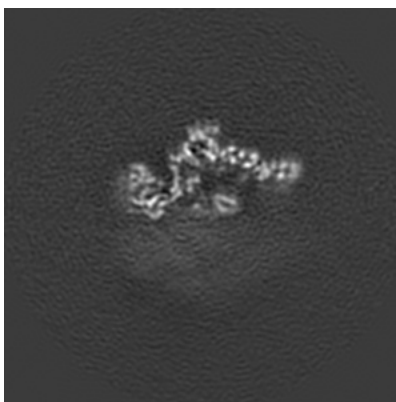
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

### 6.2 Central slices [i](#)

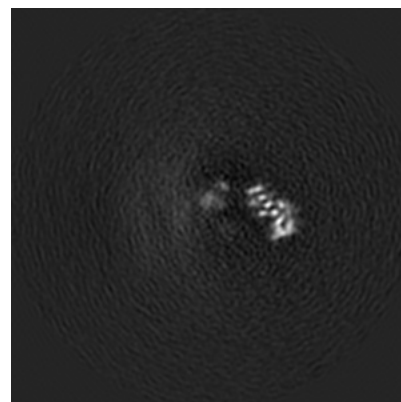
#### 6.2.1 Primary map



X Index: 150



Y Index: 150

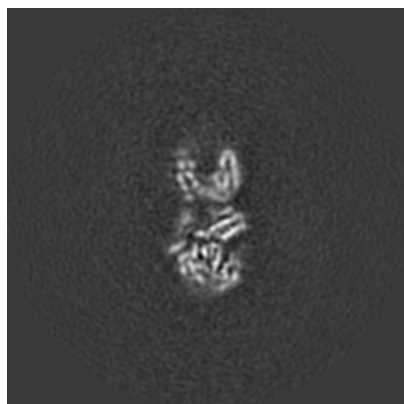


Z Index: 150

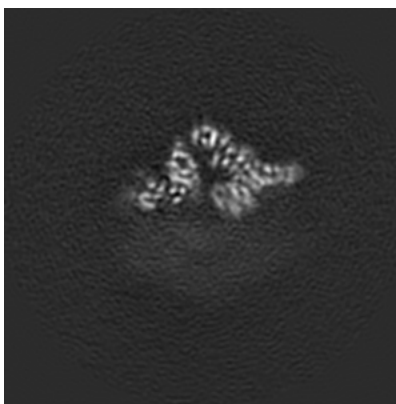
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

## 6.3 Largest variance slices [i](#)

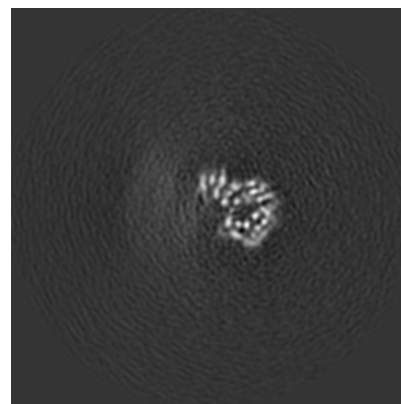
### 6.3.1 Primary map



X Index: 159



Y Index: 138

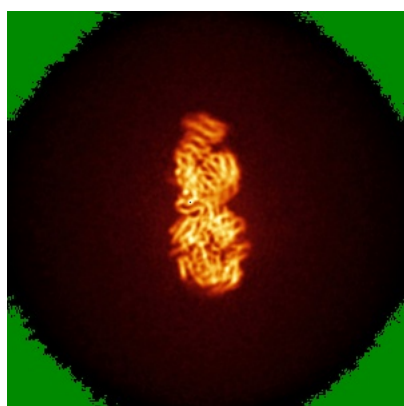


Z Index: 134

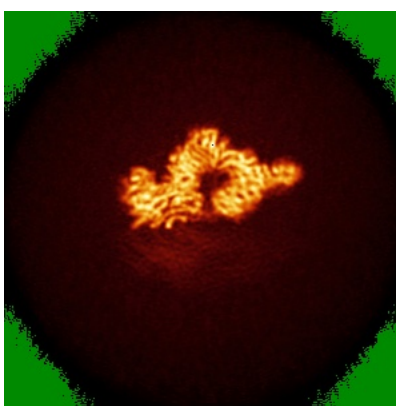
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

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

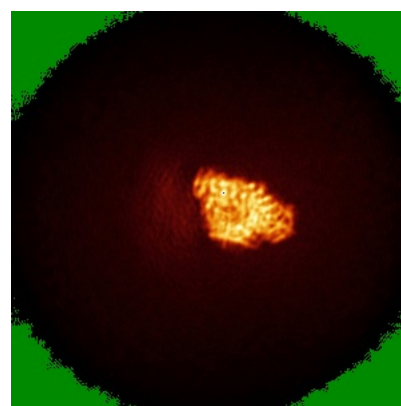
### 6.4.1 Primary map



X



Y



Z

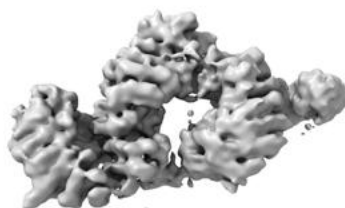
The images above show the map standard deviation projections with false color in three orthogonal directions. Minimum values are shown in green, max in blue, and dark to light orange shades represent small to large values respectively.

## 6.5 Orthogonal surface views [i](#)

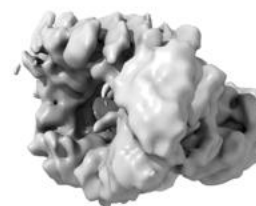
### 6.5.1 Primary map



X



Y



Z

The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.026. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

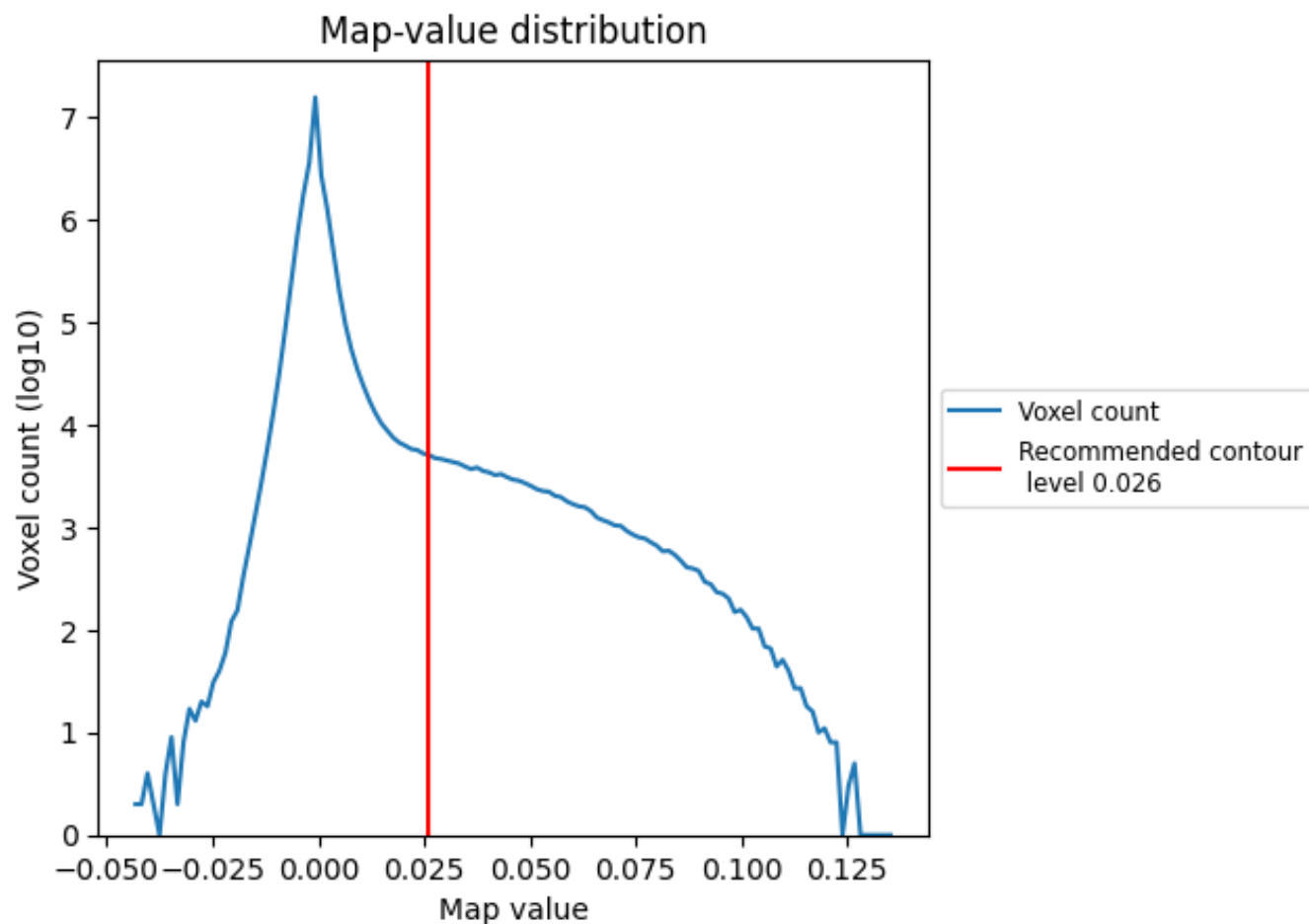
## 6.6 Mask visualisation [i](#)

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

## 7 Map analysis [i](#)

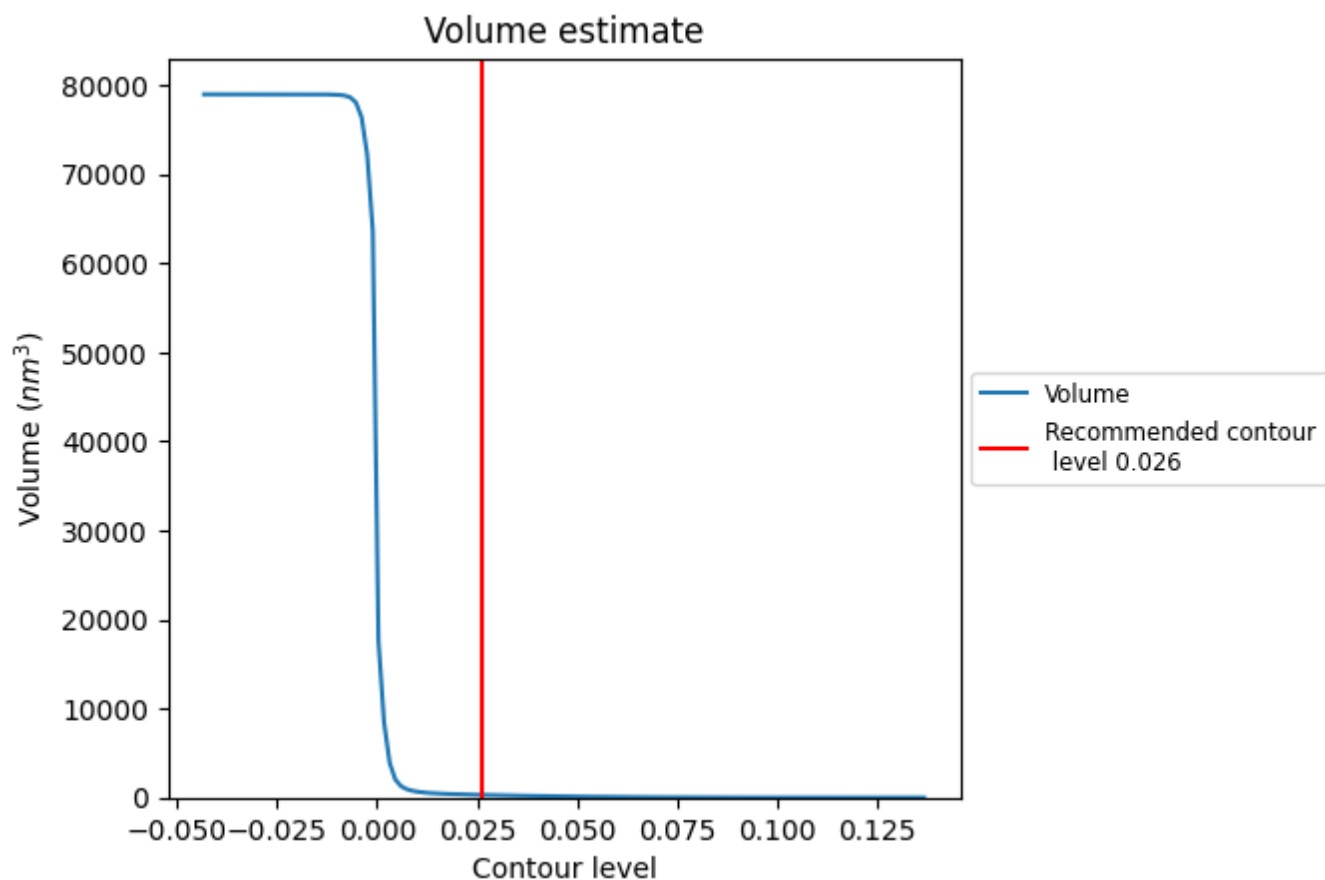
This section contains the results of statistical analysis of the map.

### 7.1 Map-value distribution [i](#)



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

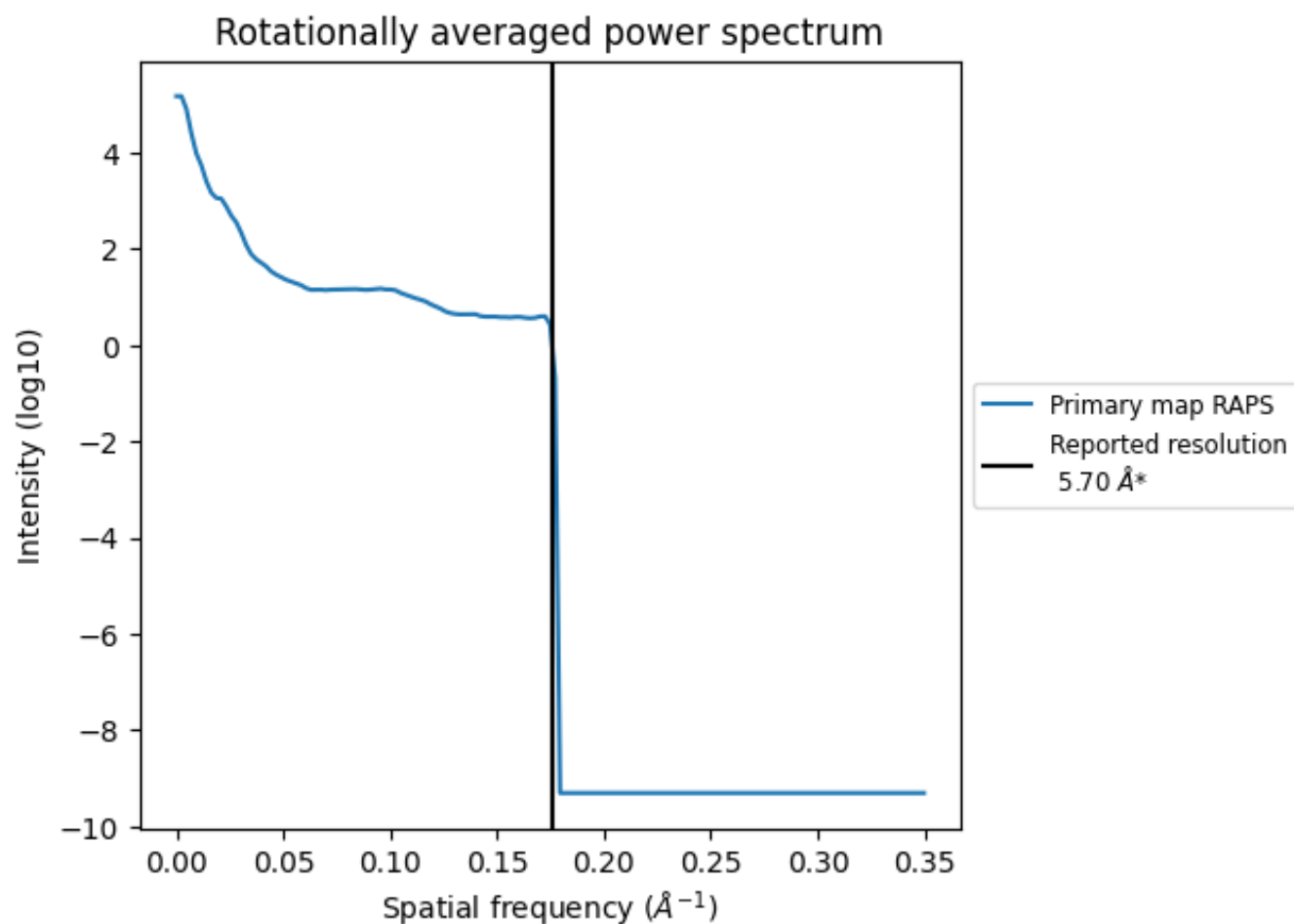
## 7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 298 nm<sup>3</sup>; this corresponds to an approximate mass of 269 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 ⓘ

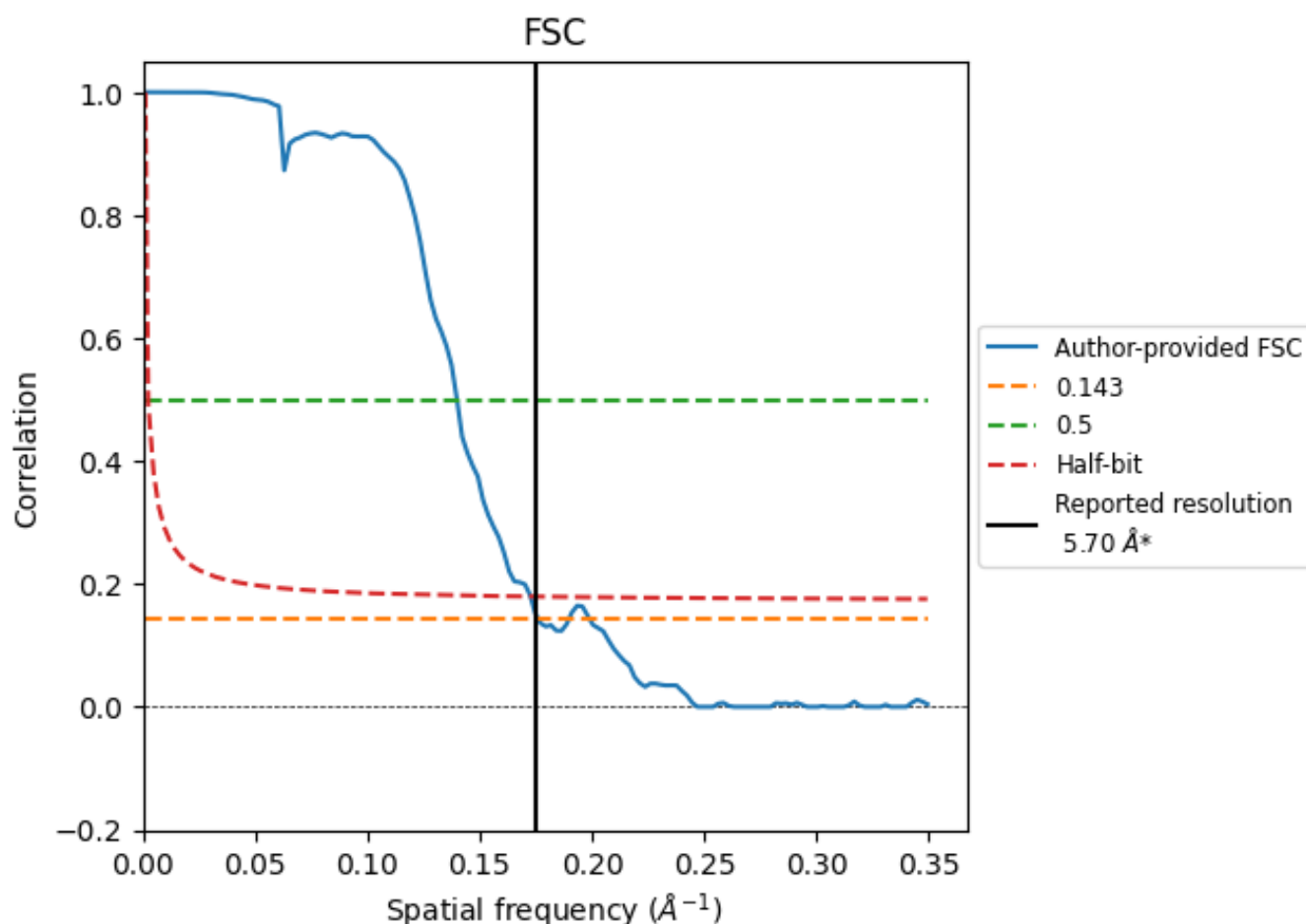


\*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.175 Å<sup>-1</sup>

## 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 0.175  $\text{\AA}^{-1}$

## 8.2 Resolution estimates [i](#)

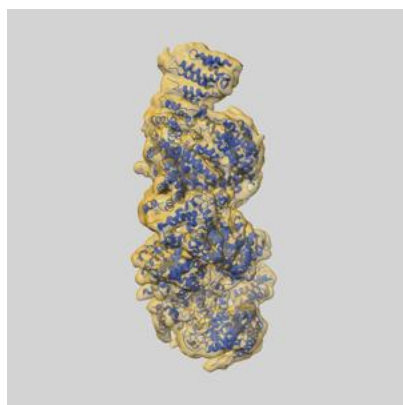
| Resolution estimate (Å)   | Estimation criterion (FSC cut-off) |      |          |
|---------------------------|------------------------------------|------|----------|
|                           | 0.143                              | 0.5  | Half-bit |
| Reported by author        | 5.70                               | -    | -        |
| Author-provided FSC curve | 5.68                               | 7.15 | 5.79     |
| Unmasked-calculated*      | -                                  | -    | -        |

\*Resolution estimate based on FSC curve calculated by comparison of deposited half-maps.

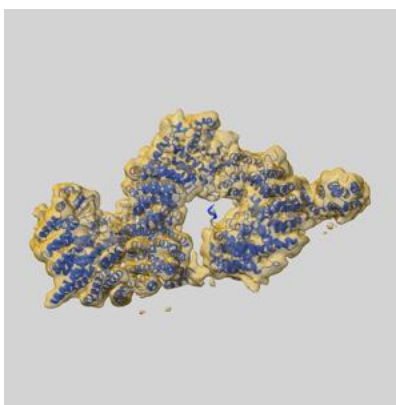
## 9 Map-model fit [i](#)

This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-3672 and PDB model 5NP1. Per-residue inclusion information can be found in [section 3](#) on [page 4](#).

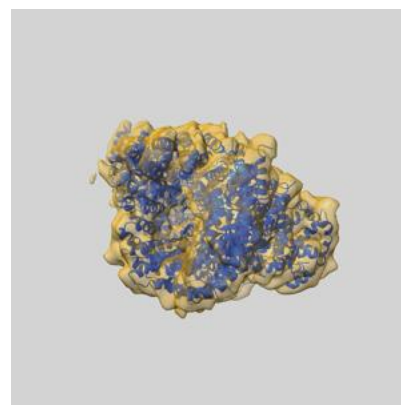
### 9.1 Map-model overlay [i](#)



X



Y



Z

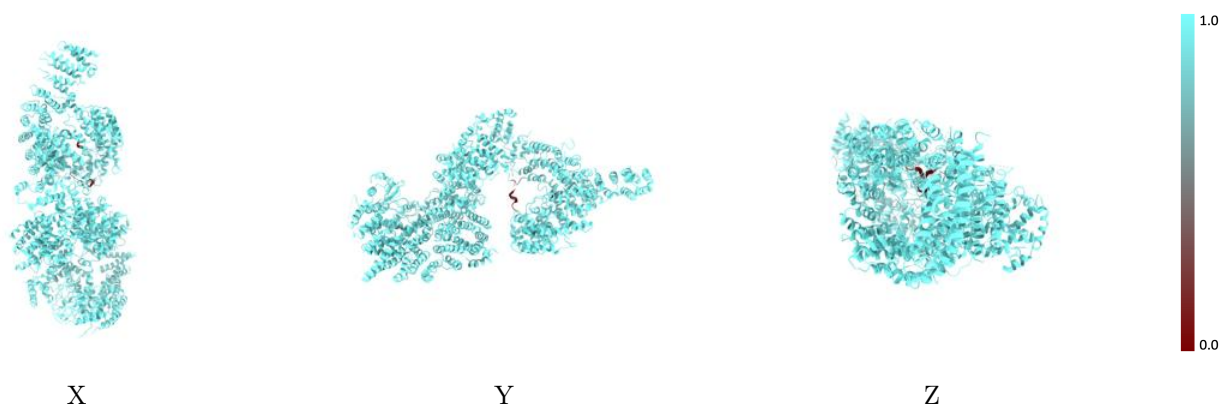
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.026 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

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



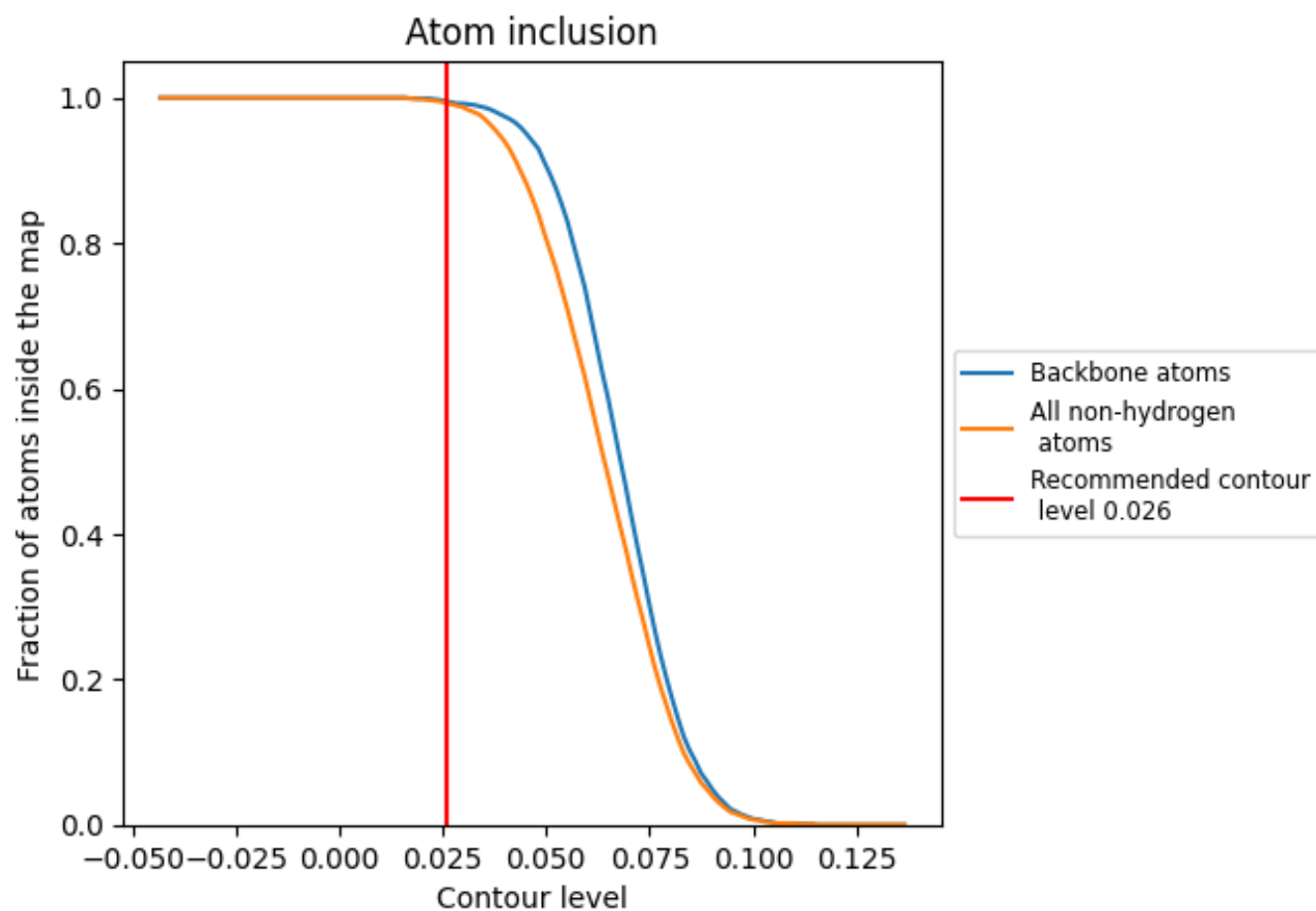
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions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

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



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.026).

## 9.4 Atom inclusion ⓘ



At the recommended contour level, 100% of all backbone atoms, 99% 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 (0.026) and Q-score for the entire model and for each chain.

| Chain | Atom inclusion                | Q-score                       |
|-------|-------------------------------|-------------------------------|
| All   | <div><div></div></div> 0.9930 | <div><div></div></div> 0.3540 |
| A     | <div><div></div></div> 0.9930 | <div><div></div></div> 0.3540 |

