



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Nov 21, 2022 – 12:20 pm GMT

PDB ID : 7Z1H
EMDB ID : EMD-14446
Title : VAR2CSA APO
Authors : Raghavan, S.S.R.; Wang, K.T.
Deposited on : 2022-02-24
Resolution : 3.12 Å (reported)

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

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

EMDB validation analysis : 0.0.0.dev97
MolProbity : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.26

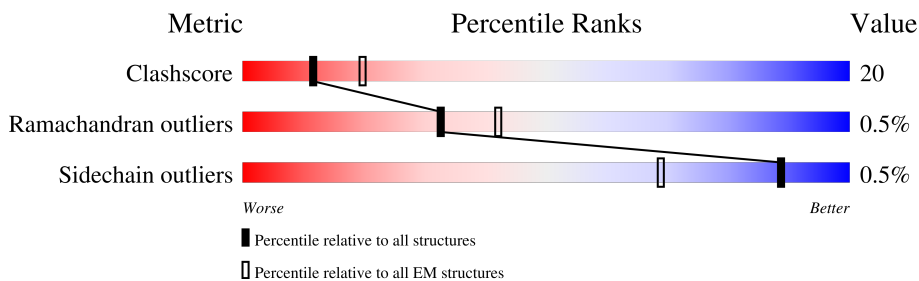
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.12 Å.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)
Clashscore	158937	4297
Ramachandran outliers	154571	4023
Sidechain outliers	154315	3826

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	2040	

2 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 15032 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 VAR2CSA APO.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
			Total	C	N	O	S		
1	A	1848	15032	9381	2590	2962	99	0	0

ILE	PRD	Y1862	Y1863	M1741	Q1630	I1497	I1376	K1293	F1147
E1970	E1971	Y1864	M1744	L1631	Q1498	K1377	K1294	F1150	
Q1972	L1865	M1745	L1632	C1632	K1502	K1378	L1295	L1154	
L1973	M1866	T1746	L1633	Y1634	C1505	L1379	L1296	Q1155	
M1974	I1866	T1747	Y1634	E1635	Y1508	L1380	K1297	D1161	
Y1983	S1874	T1748	L1636	L1636	Y1508	K1382	M1302	I1304	
K1984	E1975	M1749	F1637	F1637	I1512	G1383	A1303	I1305	
L1985	P1638	P1638	P1638	P1638	I1512	Q1386	I1304	K1306	
Y1986	I1639	I1639	I1640	I1640	K1515	W1404	K1306	E1307	
E1990	I1640	I1640	I1644	E1644	K1516	R1440	E1307	E1174	
CYS	E1645	E1645	E1645	E1645	W1519		I1308	G1187	
PHE	L1655	L1655	L1655	L1655	D1520	D1414	E1309	E1199	
ASP	E1656	E1656	E1656	E1656	K1521	A1415	E1310	K1200	
ASP	T1657	T1657	T1657	T1657	Q1522	A1419	L1310	K1201	
GLN	I1660	I1660	I1660	I1660	K1523	K1422	L1311	C1202	
THR	V1661	V1661	V1661	V1661	T1524	I1423	Y1312	C1203	
THR	E1662	E1662	E1662	E1662	K1525	I1423	Y1313	E1204	
LYS	A1663	A1663	A1663	A1663	Y1531	K1426	Y1314	M1205	
NET	E1664	E1664	E1664	E1664	W1531	N1427	H1315	E1206	
LYS	E1665	E1665	E1665	E1665	L1538		H1315	S1207	
LYS	A1666	A1666	A1666	A1666	L1539	S1430	S1323	T1208	
VAL	M1674	M1674	M1674	M1674	K1540	I1431	K1324	D1209	
VAL	M1764	M1764	M1764	M1764	I1543	F1432	M1325	T1210	
ASP	M1783	M1783	M1783	M1783	Y1543	E1436	M1326	S1215	
ASP	G1784	G1784	G1784	G1784	C1546	D1446	K1327	E1216	
ASP	V1785	V1785	V1785	V1785	I1554		Q1330	C1219	
LEU	E1786	E1786	E1786	E1786	F1555	S1450	M1334	I1227	
ILE	H1787	H1787	H1787	H1787	E1560	V1451	D1335	I1233	
ALA	I1788	I1788	I1788	I1788	Y1564	S1452	L1339	K1233	
ASP	M1792	M1792	M1792	M1792	D1569		P1340	I1239	
ASP	Q1794	Q1794	Q1794	Q1794	Y1581	R1465	K1341	I1250	
LYS	R1797	R1797	R1797	R1797	M1585	L1466	F1343	K1251	
ASP	W1798	W1798	W1798	W1798	M1586	R1467	I1352	K1252	
LYS	L1799	L1799	L1799	L1799	Y1468	Y1468	D1353	I1256	
THR	E1800	E1800	E1800	E1800	E1469	E1469	H1354	H1257	
LYS	E1801	E1801	E1801	E1801	S1594		Y1354	T1260	
LEU	M1802	M1802	M1802	M1802	M1603	I1472	M1357	I1265	
ASP	T1803	T1803	T1803	T1803	H1604	R1473	Y1366	L1272	
GLU	N1804	N1804	N1804	N1804	W1605	A1474	E1367	L1272	
ASP	L1940	L1940	L1940	L1940	S1606	A1475	H1368	W1278	
ASP	E1945	E1945	E1945	E1945	K1611	I1478	I1369	D1279	
GLU	V1946	V1946	V1946	V1946	P1626	I1487	G1370	K1280	
TRP	L1947	L1947	L1947	L1947	R1627	M1488	K1371	K1280	
ASN	M1950	M1950	M1950	M1950	R1628	S1489	L1372	G1284	
ASP	Y1954	Y1954	Y1954	Y1954	Q1629	K1490	Q1373	E1284	
ASP	M1959	M1959	M1959	M1959			E1374	M1287	
NET	K1960	K1960	K1960	K1960			D1375		
NET	T1961	T1961	T1961	T1961					
ASP	T1962	T1962	T1962	T1962					
LEU	E1963	E1963	E1963	E1963					
LEU	Y1964	Y1964	Y1964	Y1964					
ARG	V1965	V1965	V1965	V1965					
GLY	L1966	L1966	L1966	L1966					
THR	E1967	E1967	E1967	E1967					
TYR	H1968	H1968	H1968	H1968					
ASN	V1969	V1969	V1969	V1969					
ASN									
GLY									
THR									
TYR									
ASN									
LYS									
HIS									
LYS									
GLY									
VAL									
LEU									

4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	207129	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	PHASE FLIPPING AND AMPLITUDE CORRECTION	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	40	Depositor
Minimum defocus (nm)	1500	Depositor
Maximum defocus (nm)	3000	Depositor
Magnification	Not provided	
Image detector	FEI FALCON III (4k x 4k)	Depositor

5 Model quality i

5.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	A	0.86	26/15330 (0.2%)	0.58	26/20612 (0.1%)

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	7

All (26) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	374	PHE	CE2-CZ	45.16	2.23	1.37
1	A	374	PHE	CE1-CZ	43.54	2.20	1.37
1	A	374	PHE	CD2-CE2	41.85	2.23	1.39
1	A	374	PHE	CD1-CE1	40.20	2.19	1.39
1	A	374	PHE	CG-CD1	28.39	1.81	1.38
1	A	374	PHE	CG-CD2	27.44	1.79	1.38
1	A	343	GLN	C-N	11.69	1.60	1.34
1	A	1381	GLU	C-N	11.63	1.60	1.34
1	A	357	LYS	N-CA	10.71	1.67	1.46
1	A	356	ASN	C-N	9.87	1.56	1.34
1	A	1382	LYS	N-CA	8.04	1.62	1.46
1	A	337	LYS	C-N	8.00	1.52	1.34
1	A	343	GLN	N-CA	7.55	1.61	1.46
1	A	1381	GLU	N-CA	7.25	1.60	1.46
1	A	1375	ASP	CA-C	6.91	1.71	1.52
1	A	337	LYS	CA-C	6.85	1.70	1.52
1	A	344	GLU	N-CA	6.52	1.59	1.46
1	A	341	GLU	C-N	6.52	1.49	1.34
1	A	338	THR	N-CA	5.85	1.58	1.46
1	A	338	THR	CA-C	5.33	1.66	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	1381	GLU	CA-C	5.30	1.66	1.52
1	A	338	THR	C-N	5.18	1.46	1.34
1	A	1380	ILE	CA-C	5.14	1.66	1.52
1	A	1377	LYS	C-N	5.09	1.45	1.34
1	A	1377	LYS	N-CA	5.06	1.56	1.46
1	A	339	GLU	CA-C	5.03	1.66	1.52

All (26) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	356	ASN	C-N-CA	12.76	153.59	121.70
1	A	1381	GLU	C-N-CA	11.62	150.76	121.70
1	A	343	GLN	C-N-CA	10.43	147.78	121.70
1	A	341	GLU	C-N-CA	9.92	146.49	121.70
1	A	337	LYS	N-CA-CB	-8.59	95.14	110.60
1	A	1375	ASP	CA-C-N	8.57	136.04	117.20
1	A	1375	ASP	N-CA-CB	-8.10	96.01	110.60
1	A	338	THR	C-N-CA	7.69	140.91	121.70
1	A	337	LYS	C-N-CA	7.54	140.56	121.70
1	A	1375	ASP	C-N-CA	7.00	139.20	121.70
1	A	340	TRP	C-N-CA	6.53	138.01	121.70
1	A	1375	ASP	O-C-N	-6.39	112.48	122.70
1	A	344	GLU	CB-CA-C	-6.38	97.63	110.40
1	A	1376	ILE	C-N-CA	6.20	137.19	121.70
1	A	374	PHE	CB-CG-CD1	-6.18	116.48	120.80
1	A	337	LYS	CB-CA-C	6.06	122.52	110.40
1	A	1375	ASP	CB-CA-C	6.04	122.48	110.40
1	A	337	LYS	N-CA-C	5.78	126.61	111.00
1	A	337	LYS	CA-C-N	5.62	129.56	117.20
1	A	1378	LYS	C-N-CA	5.54	135.55	121.70
1	A	374	PHE	CD1-CG-CD2	5.50	125.45	118.30
1	A	337	LYS	O-C-N	-5.46	113.96	122.70
1	A	1376	ILE	CG1-CB-CG2	-5.35	99.63	111.40
1	A	1377	LYS	C-N-CA	5.21	134.73	121.70
1	A	344	GLU	N-CA-C	5.21	125.05	111.00
1	A	1375	ASP	N-CA-C	5.09	124.73	111.00

There are no chirality outliers.

All (7) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	109	ASN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	A	1375	ASP	Peptide
1	A	1376	ILE	Peptide
1	A	1380	ILE	Peptide
1	A	337	LYS	Peptide
1	A	338	THR	Peptide
1	A	342	ASN	Peptide

5.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	15032	0	14596	587	0
All	All	15032	0	14596	587	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 20.

All (587) 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:374:PHE:CD2	1:A:374:PHE:CG	1.79	1.70
1:A:374:PHE:CG	1:A:374:PHE:CD1	1.81	1.67
1:A:357:LYS:N	1:A:357:LYS:CA	1.67	1.54
1:A:357:LYS:N	1:A:374:PHE:CE2	1.94	1.36
1:A:357:LYS:N	1:A:374:PHE:CZ	1.90	1.35
1:A:374:PHE:CD1	1:A:374:PHE:CE1	2.19	1.31
1:A:374:PHE:CZ	1:A:374:PHE:CE1	2.20	1.29
1:A:374:PHE:CD2	1:A:374:PHE:CE2	2.22	1.26
1:A:374:PHE:CE2	1:A:374:PHE:CZ	2.23	1.26
1:A:357:LYS:N	1:A:374:PHE:CE1	2.03	1.25
1:A:338:THR:N	1:A:344:GLU:H	1.34	1.25
1:A:357:LYS:HA	1:A:374:PHE:CG	1.78	1.19
1:A:1376:ILE:H	1:A:1380:ILE:C	1.49	1.16
1:A:357:LYS:N	1:A:374:PHE:CD2	2.14	1.15
1:A:1376:ILE:CA	1:A:1382:LYS:H	1.63	1.12
1:A:1375:ASP:O	1:A:1379:ILE:N	1.83	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1376:ILE:N	1:A:1382:LYS:H	1.47	1.11
1:A:1375:ASP:HB3	1:A:1380:ILE:N	1.65	1.11
1:A:337:LYS:C	1:A:344:GLU:H	1.55	1.10
1:A:337:LYS:C	1:A:344:GLU:N	2.05	1.09
1:A:1375:ASP:HA	1:A:1379:ILE:H	0.95	1.06
1:A:1375:ASP:C	1:A:1382:LYS:N	2.09	1.06
1:A:340:TRP:N	1:A:344:GLU:HA	1.70	1.05
1:A:357:LYS:N	1:A:374:PHE:CD1	2.25	1.05
1:A:338:THR:N	1:A:344:GLU:N	2.03	1.04
1:A:337:LYS:H	1:A:343:GLN:N	1.57	1.03
1:A:338:THR:H	1:A:342:ASN:C	1.61	1.03
1:A:1375:ASP:O	1:A:1382:LYS:N	1.92	1.02
1:A:1375:ASP:HB3	1:A:1380:ILE:H	0.85	1.02
1:A:1375:ASP:CB	1:A:1380:ILE:H	1.73	1.01
1:A:337:LYS:CB	1:A:342:ASN:H	1.72	1.00
1:A:1375:ASP:HA	1:A:1379:ILE:N	1.76	1.00
1:A:1377:LYS:N	1:A:1381:GLU:C	2.15	0.99
1:A:1377:LYS:N	1:A:1382:LYS:N	2.11	0.99
1:A:339:GLU:N	1:A:343:GLN:C	2.16	0.98
1:A:357:LYS:N	1:A:374:PHE:CG	2.32	0.97
1:A:337:LYS:CA	1:A:341:GLU:H	1.78	0.96
1:A:1378:LYS:N	1:A:1382:LYS:HA	1.79	0.95
1:A:337:LYS:HG3	1:A:342:ASN:HB3	1.48	0.95
1:A:1378:LYS:N	1:A:1381:GLU:O	2.00	0.95
1:A:338:THR:N	1:A:343:GLN:CA	2.30	0.94
1:A:357:LYS:CA	1:A:374:PHE:CD1	2.53	0.92
1:A:1376:ILE:N	1:A:1381:GLU:CA	2.33	0.92
1:A:1376:ILE:N	1:A:1381:GLU:N	2.17	0.92
1:A:339:GLU:N	1:A:344:GLU:N	2.18	0.91
1:A:1376:ILE:CA	1:A:1382:LYS:N	2.33	0.91
1:A:1378:LYS:H	1:A:1381:GLU:C	1.72	0.91
1:A:357:LYS:CA	1:A:374:PHE:CG	2.54	0.91
1:A:1376:ILE:N	1:A:1382:LYS:N	2.15	0.91
1:A:339:GLU:C	1:A:344:GLU:HA	1.89	0.91
1:A:1375:ASP:C	1:A:1381:GLU:C	2.30	0.90
1:A:1376:ILE:H	1:A:1381:GLU:N	1.68	0.90
1:A:339:GLU:H	1:A:343:GLN:C	1.72	0.90
1:A:337:LYS:H	1:A:343:GLN:H	0.91	0.89
1:A:338:THR:CA	1:A:344:GLU:H	1.85	0.89
1:A:1375:ASP:CA	1:A:1379:ILE:H	1.84	0.89
1:A:356:ASN:C	1:A:374:PHE:CD1	2.46	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:338:THR:CA	1:A:344:GLU:N	2.37	0.88
1:A:356:ASN:O	1:A:374:PHE:CG	2.27	0.87
1:A:338:THR:H	1:A:343:GLN:N	1.71	0.87
1:A:356:ASN:C	1:A:374:PHE:CE1	2.48	0.86
1:A:337:LYS:N	1:A:343:GLN:H	1.72	0.86
1:A:337:LYS:C	1:A:342:ASN:N	2.29	0.86
1:A:356:ASN:C	1:A:374:PHE:CD2	2.49	0.86
1:A:1377:LYS:H	1:A:1381:GLU:C	1.79	0.85
1:A:1376:ILE:N	1:A:1380:ILE:C	2.29	0.84
1:A:357:LYS:HA	1:A:374:PHE:CD1	2.12	0.84
1:A:337:LYS:HB2	1:A:342:ASN:H	1.43	0.84
1:A:340:TRP:N	1:A:343:GLN:O	2.10	0.84
1:A:356:ASN:O	1:A:374:PHE:CD1	2.30	0.84
1:A:337:LYS:N	1:A:343:GLN:N	2.26	0.83
1:A:356:ASN:C	1:A:374:PHE:CG	2.51	0.83
1:A:338:THR:N	1:A:342:ASN:C	2.30	0.83
1:A:983:ASN:HA	1:A:991:ARG:HG2	1.61	0.83
1:A:1376:ILE:C	1:A:1382:LYS:N	2.32	0.83
1:A:357:LYS:CA	1:A:374:PHE:CD2	2.62	0.82
1:A:1375:ASP:C	1:A:1382:LYS:H	1.76	0.82
1:A:356:ASN:HA	1:A:374:PHE:CZ	2.15	0.81
1:A:340:TRP:H	1:A:343:GLN:C	1.84	0.81
1:A:1143:ASN:HB3	1:A:1973:LEU:HD21	1.62	0.80
1:A:337:LYS:HA	1:A:341:GLU:H	1.46	0.80
1:A:337:LYS:CB	1:A:341:GLU:H	1.95	0.79
1:A:337:LYS:O	1:A:341:GLU:N	2.15	0.79
1:A:85:ASN:ND2	1:A:91:GLY:O	2.15	0.79
1:A:338:THR:N	1:A:343:GLN:N	2.29	0.79
1:A:231:ARG:HE	1:A:232:SER:H	1.27	0.79
1:A:1378:LYS:N	1:A:1382:LYS:N	2.31	0.78
1:A:1377:LYS:C	1:A:1382:LYS:HA	2.03	0.78
1:A:167:ARG:HH12	1:A:211:ARG:HG3	1.50	0.75
1:A:1374:GLU:O	1:A:1378:LYS:HB3	1.85	0.75
1:A:256:CYS:SG	1:A:257:ARG:NH1	2.60	0.75
1:A:1968:HIS:O	1:A:1972:GLN:NE2	2.19	0.75
1:A:356:ASN:C	1:A:374:PHE:CE2	2.59	0.75
1:A:1138:VAL:HG11	1:A:1966:LEU:HD22	1.68	0.75
1:A:1375:ASP:C	1:A:1381:GLU:N	2.41	0.74
1:A:1375:ASP:C	1:A:1380:ILE:N	2.40	0.74
1:A:338:THR:N	1:A:343:GLN:C	2.41	0.74
1:A:1206:GLU:H	1:A:1207:SER:HA	1.52	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:337:LYS:O	1:A:341:GLU:CA	2.36	0.73
1:A:338:THR:C	1:A:344:GLU:N	2.41	0.73
1:A:965:GLN:HE22	1:A:967:LYS:HE3	1.53	0.73
1:A:337:LYS:O	1:A:344:GLU:HB2	1.87	0.73
1:A:1376:ILE:HA	1:A:1382:LYS:HG2	1.69	0.73
1:A:1339:LEU:HD12	1:A:1436:GLU:HA	1.70	0.73
1:A:1003:GLU:O	1:A:1117:ASN:ND2	2.20	0.73
1:A:1041:GLU:HB2	1:A:1853:ARG:HH22	1.53	0.73
1:A:337:LYS:CA	1:A:342:ASN:H	2.00	0.73
1:A:337:LYS:HB2	1:A:342:ASN:N	2.04	0.73
1:A:629:LYS:HB2	1:A:727:ALA:HB1	1.69	0.73
1:A:1375:ASP:CA	1:A:1381:GLU:N	2.51	0.72
1:A:340:TRP:N	1:A:344:GLU:N	2.38	0.72
1:A:527:CYS:SG	1:A:528:GLN:N	2.63	0.72
1:A:357:LYS:CA	1:A:374:PHE:CE1	2.72	0.72
1:A:951:SER:O	1:A:953:LEU:N	2.22	0.71
1:A:1219:CYS:HB3	1:A:1422:LYS:HE2	1.71	0.71
1:A:1375:ASP:H	1:A:1381:GLU:H	1.36	0.71
1:A:338:THR:H	1:A:343:GLN:CA	2.00	0.71
1:A:302:ARG:HH22	1:A:319:CYS:HB3	1.56	0.71
1:A:984:GLN:OE1	1:A:991:ARG:NE	2.22	0.71
1:A:1371:LYS:O	1:A:1375:ASP:HB2	1.90	0.71
1:A:206:LYS:HD2	1:A:209:LYS:HD3	1.73	0.71
1:A:1375:ASP:O	1:A:1379:ILE:CA	2.39	0.71
1:A:356:ASN:C	1:A:374:PHE:CZ	2.64	0.70
1:A:1323:SER:O	1:A:1330:GLN:NE2	2.24	0.70
1:A:340:TRP:N	1:A:344:GLU:CA	2.53	0.70
1:A:1378:LYS:N	1:A:1382:LYS:CA	2.55	0.70
1:A:587:LEU:HD13	1:A:655:TYR:HE1	1.56	0.70
1:A:1880:TYR:HB3	1:A:1883:ILE:HD12	1.74	0.69
1:A:1378:LYS:N	1:A:1381:GLU:C	2.43	0.69
1:A:1376:ILE:N	1:A:1381:GLU:C	2.45	0.69
1:A:338:THR:N	1:A:343:GLN:HA	2.08	0.69
1:A:519:CYS:SG	1:A:520:ASP:N	2.65	0.69
1:A:337:LYS:C	1:A:343:GLN:C	2.51	0.69
1:A:1970:GLU:O	1:A:1974:ASN:ND2	2.26	0.69
1:A:337:LYS:O	1:A:341:GLU:C	2.32	0.68
1:A:990:ALA:O	1:A:1106:LYS:NZ	2.23	0.68
1:A:583:ARG:NH1	1:A:654:ASP:OD2	2.25	0.68
1:A:139:ILE:HD11	1:A:154:ALA:HB1	1.75	0.68
1:A:986:SER:OG	1:A:1008:ASN:OD1	2.09	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:337:LYS:CA	1:A:343:GLN:C	2.62	0.68
1:A:357:LYS:CA	1:A:357:LYS:H	2.00	0.67
1:A:63:LYS:HA	1:A:110:LEU:HD13	1.77	0.66
1:A:337:LYS:HB2	1:A:341:GLU:CA	2.25	0.66
1:A:1375:ASP:N	1:A:1381:GLU:H	1.93	0.66
1:A:1312:TYR:OH	1:A:1427:ASN:ND2	2.28	0.66
1:A:357:LYS:C	1:A:374:PHE:CE1	2.69	0.66
1:A:957:PRO:HG2	1:A:960:TYR:HB2	1.76	0.66
1:A:1699:GLU:OE1	1:A:1757:ARG:NH1	2.29	0.66
1:A:1488:ASN:O	1:A:1498:GLN:NE2	2.27	0.66
1:A:337:LYS:HA	1:A:341:GLU:N	2.11	0.66
1:A:258:LYS:HD3	1:A:259:CYS:H	1.62	0.65
1:A:337:LYS:CA	1:A:343:GLN:N	2.59	0.65
1:A:1378:LYS:CA	1:A:1382:LYS:HA	2.26	0.65
1:A:1142:SER:OG	1:A:1187:GLY:N	2.29	0.65
1:A:1376:ILE:HA	1:A:1382:LYS:H	1.60	0.65
1:A:336:TRP:O	1:A:340:TRP:HB3	1.97	0.65
1:A:50:ASN:O	1:A:50:ASN:ND2	2.28	0.65
1:A:187:PHE:HA	1:A:190:ILE:HG22	1.79	0.65
1:A:356:ASN:CA	1:A:374:PHE:CZ	2.79	0.65
1:A:991:ARG:HA	1:A:1106:LYS:HZ3	1.60	0.65
1:A:357:LYS:HA	1:A:374:PHE:CD2	2.31	0.64
1:A:337:LYS:CA	1:A:341:GLU:N	2.56	0.64
1:A:357:LYS:N	1:A:357:LYS:HA	1.99	0.64
1:A:1279:ASP:HB2	1:A:1287:ASN:HD21	1.63	0.64
1:A:676:ASN:O	1:A:680:ASN:ND2	2.30	0.64
1:A:1375:ASP:CB	1:A:1380:ILE:N	2.45	0.63
1:A:357:LYS:CA	1:A:374:PHE:CE2	2.81	0.63
1:A:1375:ASP:CA	1:A:1381:GLU:H	2.11	0.63
1:A:1674:ASN:ND2	1:A:1684:ASN:OD1	2.31	0.63
1:A:338:THR:HG22	1:A:343:GLN:HA	1.80	0.63
1:A:340:TRP:CA	1:A:344:GLU:HA	2.28	0.63
1:A:1377:LYS:HB3	1:A:1381:GLU:CD	2.19	0.63
1:A:1096:LYS:HA	1:A:1100:TYR:HB3	1.81	0.63
1:A:1206:GLU:N	1:A:1207:SER:HA	2.13	0.63
1:A:1933:CYS:HB2	1:A:1935:GLU:HA	1.80	0.62
1:A:340:TRP:N	1:A:343:GLN:C	2.53	0.62
1:A:1310:LEU:O	1:A:1314:TYR:N	2.29	0.62
1:A:357:LYS:CB	1:A:374:PHE:CE2	2.82	0.62
1:A:337:LYS:N	1:A:343:GLN:CA	2.63	0.62
1:A:1377:LYS:HA	1:A:1383:GLY:N	2.15	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:336:TRP:HA	1:A:343:GLN:HB3	1.81	0.61
1:A:794:LYS:NZ	1:A:797:THR:OG1	2.31	0.61
1:A:81:LYS:HB3	1:A:92:LYS:H	1.64	0.61
1:A:587:LEU:HD12	1:A:590:GLY:H	1.64	0.61
1:A:894:LEU:HD11	1:A:903:ASN:HD22	1.64	0.61
1:A:1377:LYS:C	1:A:1382:LYS:CA	2.69	0.61
1:A:1863:TYR:HA	1:A:1866:ILE:HG22	1.82	0.61
1:A:753:ILE:HA	1:A:756:ILE:HD12	1.82	0.61
1:A:1013:LYS:H	1:A:1950:MET:HE1	1.66	0.61
1:A:30:ALA:HB3	1:A:125:LEU:HD22	1.81	0.61
1:A:1892:LEU:HB3	1:A:1940:LEU:HD21	1.83	0.61
1:A:249:ARG:NH2	1:A:256:CYS:SG	2.68	0.60
1:A:712:TRP:O	1:A:716:LYS:HB3	2.01	0.60
1:A:799:CYS:SG	1:A:804:LYS:NZ	2.74	0.60
1:A:648:LEU:HD12	1:A:723:MET:HG2	1.84	0.60
1:A:992:THR:H	1:A:1106:LYS:HD3	1.66	0.60
1:A:1839:LYS:HA	1:A:1964:VAL:HG11	1.83	0.60
1:A:1375:ASP:O	1:A:1382:LYS:CB	2.50	0.60
1:A:1376:ILE:HA	1:A:1382:LYS:CG	2.32	0.60
1:A:1540:LYS:HA	1:A:1546:CYS:HB2	1.84	0.60
1:A:337:LYS:C	1:A:343:GLN:N	2.56	0.59
1:A:573:GLU:O	1:A:841:ARG:NH1	2.35	0.59
1:A:637:ASN:ND2	1:A:640:ASN:O	2.34	0.59
1:A:1792:LYS:O	1:A:1797:ARG:NH1	2.35	0.59
1:A:337:LYS:HG3	1:A:342:ASN:CB	2.28	0.59
1:A:1375:ASP:O	1:A:1382:LYS:CA	2.51	0.59
1:A:175:THR:O	1:A:178:ASN:ND2	2.34	0.59
1:A:1013:LYS:HE3	1:A:1018:ARG:HH21	1.67	0.59
1:A:1375:ASP:O	1:A:1382:LYS:HB3	2.02	0.59
1:A:1375:ASP:CG	1:A:1379:ILE:HB	2.23	0.59
1:A:1378:LYS:C	1:A:1382:LYS:HB3	2.23	0.59
1:A:1758:GLN:NE2	1:A:1786:GLU:O	2.32	0.59
1:A:337:LYS:O	1:A:344:GLU:CB	2.50	0.59
1:A:102:ARG:NH2	1:A:282:GLU:OE2	2.36	0.58
1:A:1371:LYS:HG2	1:A:1375:ASP:OD2	2.04	0.58
1:A:1375:ASP:C	1:A:1379:ILE:C	2.62	0.58
1:A:587:LEU:HD13	1:A:655:TYR:CE1	2.37	0.58
1:A:1164:LYS:HD3	1:A:1972:GLN:HG2	1.86	0.58
1:A:1370:GLY:O	1:A:1373:GLN:N	2.36	0.58
1:A:33:SER:HB3	1:A:48:LYS:HD2	1.84	0.58
1:A:1376:ILE:N	1:A:1380:ILE:CA	2.66	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:337:LYS:HB2	1:A:341:GLU:C	2.24	0.57
1:A:357:LYS:CA	1:A:374:PHE:CZ	2.86	0.57
1:A:1744:ASN:OD1	1:A:1746:THR:OG1	2.22	0.57
1:A:192:GLU:HA	1:A:198:GLN:HE22	1.69	0.57
1:A:339:GLU:C	1:A:344:GLU:CA	2.67	0.57
1:A:1107:ILE:HD12	1:A:1110:GLN:HB3	1.87	0.57
1:A:1256:ILE:HG13	1:A:1257:HIS:CD2	2.39	0.57
1:A:1984:LYS:O	1:A:1986:TYR:N	2.35	0.57
1:A:1368:HIS:O	1:A:1368:HIS:ND1	2.38	0.57
1:A:37:TYR:HB2	1:A:42:GLY:HA3	1.85	0.57
1:A:525:ASP:O	1:A:610:LYS:NZ	2.38	0.57
1:A:1375:ASP:C	1:A:1381:GLU:CA	2.72	0.57
1:A:1375:ASP:H	1:A:1381:GLU:N	2.01	0.57
1:A:1635:GLU:OE2	1:A:1664:ARG:NH1	2.37	0.57
1:A:1138:VAL:HG21	1:A:1966:LEU:HD13	1.87	0.57
1:A:337:LYS:O	1:A:342:ASN:N	2.38	0.56
1:A:1204:GLU:N	1:A:1205:ASN:HA	2.19	0.56
1:A:853:ARG:HH22	1:A:866:THR:HG23	1.69	0.56
1:A:8:ALA:HA	1:A:12:GLU:HB2	1.87	0.56
1:A:800:LYS:HG3	1:A:801:THR:H	1.69	0.56
1:A:1315:HIS:HD2	1:A:1343:PHE:HB3	1.70	0.56
1:A:1199:GLU:HG3	1:A:1200:LYS:H	1.70	0.56
1:A:1954:TYR:HH	1:A:1961:CYS:HG	1.52	0.56
1:A:239:ARG:O	1:A:257:ARG:NE	2.37	0.56
1:A:1874:SER:OG	1:A:1876:ASP:O	2.22	0.56
1:A:1250:ILE:HB	1:A:1265:ILE:HB	1.86	0.56
1:A:356:ASN:CA	1:A:374:PHE:CE2	2.88	0.56
1:A:560:TRP:HH2	1:A:838:ILE:HD11	1.71	0.56
1:A:1757:ARG:HH21	1:A:1788:ILE:HG23	1.72	0.55
1:A:1794:GLN:H	1:A:1878:LYS:NZ	2.04	0.55
1:A:1628:ARG:HH22	1:A:1713:THR:HG21	1.71	0.55
1:A:328:LYS:HB2	1:A:332:CYS:HB2	1.87	0.55
1:A:1202:CYS:N	1:A:1203:LYS:HB2	2.22	0.55
1:A:1488:ASN:OD1	1:A:1490:LYS:NZ	2.40	0.55
1:A:170:ASP:O	1:A:173:LYS:NZ	2.32	0.55
1:A:984:GLN:HB3	1:A:1007:TYR:CE1	2.42	0.55
1:A:1375:ASP:C	1:A:1379:ILE:N	2.57	0.55
1:A:1376:ILE:H	1:A:1380:ILE:CA	2.18	0.55
1:A:1755:THR:HG23	1:A:1758:GLN:H	1.72	0.55
1:A:1911:ASN:HB3	1:A:1916:ASN:HA	1.88	0.54
1:A:1120:LYS:O	1:A:1124:LYS:NZ	2.41	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:337:LYS:H	1:A:343:GLN:CA	2.21	0.54
1:A:1377:LYS:H	1:A:1381:GLU:CA	2.20	0.54
1:A:583:ARG:NH2	1:A:650:TYR:HB3	2.22	0.54
1:A:127:ASP:OD1	1:A:128:VAL:N	2.41	0.54
1:A:1380:ILE:HG12	1:A:1380:ILE:O	2.08	0.54
1:A:1700:ASP:OD2	1:A:1797:ARG:NH2	2.37	0.54
1:A:125:LEU:HG	1:A:129:LEU:HD13	1.90	0.54
1:A:1239:ILE:HA	1:A:1319:THR:HG21	1.90	0.54
1:A:1423:ILE:HA	1:A:1426:LYS:HZ1	1.73	0.54
1:A:1423:ILE:HA	1:A:1426:LYS:NZ	2.22	0.54
1:A:279:TRP:NE1	1:A:282:GLU:OE1	2.40	0.53
1:A:1468:TYR:O	1:A:1472:ILE:HG12	2.08	0.53
1:A:511:ARG:NH1	1:A:514:SER:H	2.07	0.53
1:A:1103:TRP:HA	1:A:1106:LYS:HE3	1.91	0.53
1:A:1233:LYS:H	1:A:1310:LEU:HD22	1.74	0.53
1:A:1375:ASP:N	1:A:1381:GLU:N	2.56	0.53
1:A:1414:ASP:OD1	1:A:1415:ALA:N	2.41	0.53
1:A:1497:ILE:HG13	1:A:1502:LYS:HB2	1.90	0.53
1:A:54:ILE:HD13	1:A:129:LEU:HB3	1.90	0.53
1:A:804:LYS:HG3	1:A:965:GLN:HA	1.91	0.53
1:A:1691:ILE:HD12	1:A:1783:MET:HE1	1.91	0.53
1:A:1633:LEU:HD11	1:A:1712:TYR:HB3	1.91	0.53
1:A:338:THR:CG2	1:A:343:GLN:HA	2.38	0.53
1:A:991:ARG:HA	1:A:1106:LYS:NZ	2.24	0.53
1:A:1419:ALA:O	1:A:1423:ILE:HG12	2.09	0.53
1:A:304:GLU:HB3	1:A:314:GLU:HB3	1.90	0.52
1:A:786:LYS:HD2	1:A:790:GLU:HA	1.90	0.52
1:A:985:TRP:HB2	1:A:989:SER:HB3	1.91	0.52
1:A:850:LYS:HD2	1:A:864:SER:O	2.09	0.52
1:A:1682:ASP:OD1	1:A:1682:ASP:N	2.42	0.52
1:A:256:CYS:HA	1:A:257:ARG:HD2	1.92	0.52
1:A:1374:GLU:HA	1:A:1381:GLU:OE1	2.10	0.52
1:A:1125:GLN:HB2	1:A:1129:ALA:HB2	1.92	0.52
1:A:841:ARG:HE	1:A:845:HIS:CD2	2.28	0.52
1:A:1227:ILE:HD11	1:A:1302:ASN:HD21	1.75	0.52
1:A:145:ASP:OD1	1:A:146:THR:N	2.41	0.52
1:A:337:LYS:CB	1:A:342:ASN:N	2.54	0.52
1:A:1306:LYS:O	1:A:1309:GLU:HG3	2.10	0.52
1:A:337:LYS:CA	1:A:342:ASN:N	2.69	0.52
1:A:338:THR:CA	1:A:343:GLN:HA	2.40	0.52
1:A:1800:GLU:OE2	1:A:1895:ARG:NE	2.43	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1325:ASN:OD1	1:A:1330:GLN:NE2	2.43	0.51
1:A:1252:LYS:HB2	1:A:1260:THR:O	2.10	0.51
1:A:526:GLU:HA	1:A:610:LYS:HD2	1.92	0.51
1:A:357:LYS:HB2	1:A:374:PHE:CE2	2.46	0.51
1:A:1375:ASP:O	1:A:1378:LYS:C	2.46	0.51
1:A:45:ASP:OD1	1:A:46:TYR:N	2.43	0.51
1:A:1143:ASN:HB3	1:A:1973:LEU:CD2	2.38	0.51
1:A:1375:ASP:CA	1:A:1380:ILE:N	2.73	0.51
1:A:1853:ARG:HA	1:A:1947:LEU:HD13	1.93	0.51
1:A:775:GLN:HA	1:A:778:VAL:HG12	1.92	0.51
1:A:1375:ASP:O	1:A:1379:ILE:C	2.48	0.51
1:A:511:ARG:HD2	1:A:513:SER:H	1.76	0.51
1:A:1569:ASP:N	1:A:1569:ASP:OD1	2.43	0.51
1:A:340:TRP:C	1:A:344:GLU:HB2	2.31	0.51
1:A:374:PHE:CD1	1:A:374:PHE:CB	2.82	0.51
1:A:990:ALA:HB2	1:A:1107:ILE:HD13	1.93	0.51
1:A:1720:LEU:HD22	1:A:1724:PHE:HE2	1.76	0.51
1:A:615:ALA:O	1:A:619:ILE:HG12	2.11	0.50
1:A:799:CYS:HB2	1:A:803:CYS:H	1.77	0.50
1:A:940:SER:HB2	1:A:943:THR:HG23	1.92	0.50
1:A:1376:ILE:HG12	1:A:1376:ILE:O	2.12	0.50
1:A:1666:ALA:HB2	1:A:1764:MET:HG2	1.91	0.50
1:A:68:GLU:HG3	1:A:110:LEU:HA	1.93	0.50
1:A:1375:ASP:CA	1:A:1381:GLU:C	2.80	0.50
1:A:1933:CYS:HB2	1:A:1934:GLU:HA	1.93	0.50
1:A:337:LYS:N	1:A:343:GLN:C	2.65	0.50
1:A:1138:VAL:HG12	1:A:1139:VAL:H	1.76	0.50
1:A:1376:ILE:N	1:A:1381:GLU:HA	2.24	0.50
1:A:1603:MET:HE1	1:A:1630:GLN:HB3	1.93	0.50
1:A:1945:GLU:HG3	1:A:1950:MET:HB2	1.93	0.50
1:A:1502:LYS:HA	1:A:1505:CYS:SG	2.52	0.50
1:A:337:LYS:HB3	1:A:340:TRP:HE3	1.76	0.50
1:A:1519:TRP:CZ2	1:A:1523:LYS:HD3	2.47	0.50
1:A:1272:LEU:HD21	1:A:1354:TYR:HE1	1.77	0.49
1:A:1377:LYS:CA	1:A:1382:LYS:N	2.75	0.49
1:A:221:LYS:O	1:A:225:VAL:HG23	2.13	0.49
1:A:1335:ASP:OD2	1:A:1341:LYS:N	2.44	0.49
1:A:522:LYS:NZ	1:A:713:ASN:O	2.33	0.49
1:A:337:LYS:CG	1:A:342:ASN:H	2.24	0.49
1:A:711:TRP:O	1:A:714:THR:OG1	2.23	0.49
1:A:1564:TYR:CD2	1:A:1594:SER:HA	2.48	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:511:ARG:HD2	1:A:512:GLY:N	2.28	0.49
1:A:939:GLN:HG2	1:A:940:SER:N	2.28	0.49
1:A:1422:LYS:HD2	1:A:1426:LYS:NZ	2.28	0.49
1:A:653:ALA:HB2	1:A:753:ILE:HG23	1.94	0.49
1:A:1719:LYS:O	1:A:1723:ILE:HG12	2.12	0.49
1:A:1636:LEU:HD12	1:A:1661:VAL:HG21	1.94	0.49
1:A:582:PRO:HA	1:A:585:GLN:HE21	1.77	0.48
1:A:1747:ILE:HG21	1:A:1759:LEU:HD11	1.95	0.48
1:A:1349:ARG:NH2	1:A:1543:TYR:OH	2.46	0.48
1:A:1611:LYS:HD2	1:A:1707:LEU:HA	1.95	0.48
1:A:338:THR:C	1:A:345:ASN:N	2.66	0.48
1:A:1357:MET:HG2	1:A:1369:ILE:HD12	1.95	0.48
1:A:532:GLU:HG3	1:A:533:LYS:HG3	1.96	0.48
1:A:72:PRO:HB2	1:A:75:ASP:OD2	2.14	0.48
1:A:1136:LYS:HD2	1:A:1139:VAL:HA	1.95	0.48
1:A:1662:ALA:HB1	1:A:1764:MET:HG3	1.96	0.48
1:A:1209:ASP:HA	1:A:1210:THR:HA	1.61	0.47
1:A:1122:ARG:HD3	1:A:1140:SER:HA	1.96	0.47
1:A:1134:GLN:NE2	1:A:1136:LYS:HB2	2.29	0.47
1:A:1138:VAL:HG12	1:A:1139:VAL:N	2.28	0.47
1:A:1581:TYR:N	1:A:1656:GLU:OE1	2.38	0.47
1:A:358:THR:N	1:A:374:PHE:CE1	2.83	0.47
1:A:700:SER:OG	1:A:701:TYR:N	2.47	0.47
1:A:337:LYS:C	1:A:342:ASN:C	2.73	0.47
1:A:659:ILE:HD11	1:A:712:TRP:CE3	2.49	0.47
1:A:1516:LYS:NZ	1:A:1555:PHE:O	2.46	0.47
1:A:1475:ALA:HA	1:A:1478:ILE:HG22	1.96	0.47
1:A:338:THR:HA	1:A:345:ASN:H	1.79	0.47
1:A:1029:VAL:HG21	1:A:1959:MET:SD	2.54	0.47
1:A:1161:ASP:HB3	1:A:1847:ASN:ND2	2.29	0.47
1:A:856:GLY:H	1:A:858:LYS:HZ1	1.62	0.47
1:A:1233:LYS:H	1:A:1310:LEU:CD2	2.28	0.47
1:A:1252:LYS:HE3	1:A:1521:LYS:HB3	1.96	0.47
1:A:1375:ASP:N	1:A:1381:GLU:CA	2.78	0.47
1:A:1377:LYS:HA	1:A:1382:LYS:C	2.35	0.47
1:A:1933:CYS:H	1:A:1934:GLU:HB2	1.80	0.47
1:A:287:PHE:HA	1:A:290:GLU:HG2	1.97	0.47
1:A:208:THR:HA	1:A:211:ARG:HG2	1.97	0.47
1:A:522:LYS:HG3	1:A:524:GLN:OE1	2.15	0.47
1:A:1375:ASP:HB3	1:A:1380:ILE:CA	2.42	0.47
1:A:258:LYS:HD3	1:A:259:CYS:N	2.27	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:580:LEU:HD12	1:A:581:PRO:HD2	1.97	0.46
1:A:794:LYS:HD2	1:A:796:LYS:HE3	1.95	0.46
1:A:1377:LYS:CA	1:A:1381:GLU:C	2.83	0.46
1:A:523:ASN:HB2	1:A:710:SER:OG	2.15	0.46
1:A:832:SER:OG	1:A:948:ASN:ND2	2.42	0.46
1:A:1457:TRP:CH2	1:A:1519:TRP:HB2	2.51	0.46
1:A:179:LEU:HA	1:A:182:ASN:HB3	1.98	0.46
1:A:624:GLU:OE1	1:A:655:TYR:OH	2.21	0.46
1:A:1106:LYS:HE3	1:A:1106:LYS:HB3	1.68	0.46
1:A:1349:ARG:HE	1:A:1456:GLU:HB2	1.81	0.46
1:A:1376:ILE:HG22	1:A:1381:GLU:HA	1.97	0.46
1:A:1628:ARG:NH2	1:A:1706:ASP:OD2	2.38	0.46
1:A:31:ASP:O	1:A:33:SER:N	2.49	0.46
1:A:1202:CYS:HA	1:A:1203:LYS:C	2.35	0.46
1:A:161:ASP:O	1:A:165:ILE:HG12	2.15	0.46
1:A:337:LYS:CB	1:A:341:GLU:N	2.73	0.46
1:A:1155:GLN:OE1	1:A:1161:ASP:N	2.49	0.46
1:A:1203:LYS:HB3	1:A:1204:GLU:C	2.36	0.46
1:A:1687:ALA:O	1:A:1691:ILE:HG13	2.16	0.46
1:A:25:ASP:HA	1:A:28:LEU:HB2	1.98	0.46
1:A:561:LYS:HG2	1:A:562:LYS:H	1.80	0.46
1:A:582:PRO:HA	1:A:585:GLN:HG2	1.98	0.46
1:A:655:TYR:HD2	1:A:723:MET:HE1	1.80	0.46
1:A:724:LYS:HG3	1:A:729:MET:HG2	1.98	0.46
1:A:858:LYS:HD2	1:A:878:VAL:HG12	1.98	0.46
1:A:1307:GLU:O	1:A:1311:LEU:HG	2.15	0.46
1:A:177:SER:O	1:A:181:LYS:HG2	2.16	0.46
1:A:203:LYS:O	1:A:206:LYS:NZ	2.48	0.46
1:A:337:LYS:HA	1:A:343:GLN:C	2.35	0.46
1:A:1147:PHE:CE2	1:A:1969:VAL:HG22	2.51	0.46
1:A:1632:CYS:SG	1:A:1664:ARG:NH2	2.89	0.46
1:A:1761:TRP:NE1	1:A:1785:VAL:O	2.39	0.46
1:A:337:LYS:O	1:A:344:GLU:N	2.44	0.46
1:A:338:THR:H	1:A:343:GLN:HA	1.74	0.46
1:A:1058:ILE:HB	1:A:1059:ASP:HB3	1.98	0.46
1:A:901:LEU:HA	1:A:904:VAL:HG22	1.96	0.46
1:A:1038:TRP:O	1:A:1042:ILE:HG12	2.16	0.46
1:A:1376:ILE:CA	1:A:1381:GLU:HA	2.46	0.46
1:A:1058:ILE:HA	1:A:1059:ASP:HA	1.76	0.45
1:A:1326:ASP:OD1	1:A:1327:LYS:N	2.49	0.45
1:A:385:GLU:HB3	1:A:387:TYR:HD1	1.81	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:788:CYS:HB2	1:A:794:LYS:HE3	1.97	0.45
1:A:1304:ILE:HG22	1:A:1354:TYR:HE2	1.81	0.45
1:A:1013:LYS:N	1:A:1950:MET:HE1	2.30	0.45
1:A:1508:TYR:O	1:A:1512:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:1903:ASN:O	1:A:1905:ILE:N	2.47	0.45
1:A:633:PRO:HA	1:A:634:GLN:HA	1.54	0.45
1:A:805:ASP:OD1	1:A:806:GLU:N	2.50	0.45
1:A:856:GLY:N	1:A:858:LYS:HZ1	2.15	0.45
1:A:1035:PHE:CZ	1:A:1141:LEU:HD11	2.52	0.45
1:A:1375:ASP:H	1:A:1381:GLU:CA	2.29	0.45
1:A:1828:ASP:OD1	1:A:1833:ASN:ND2	2.38	0.45
1:A:932:GLU:OE2	1:A:939:GLN:NE2	2.41	0.45
1:A:1133:SER:HA	1:A:1134:GLN:HA	1.46	0.45
1:A:1965:TYR:O	1:A:1969:VAL:HG23	2.16	0.45
1:A:106:CYS:SG	1:A:134:ASN:HB3	2.57	0.45
1:A:1203:LYS:HB3	1:A:1204:GLU:CA	2.47	0.45
1:A:1636:LEU:O	1:A:1640:ILE:HG12	2.17	0.45
1:A:1655:LEU:HD13	1:A:1756:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:1794:GLN:H	1:A:1878:LYS:HZ3	1.64	0.45
1:A:143:HIS:O	1:A:692:ASN:ND2	2.50	0.45
1:A:786:LYS:NZ	1:A:960:TYR:OH	2.36	0.45
1:A:1203:LYS:CB	1:A:1204:GLU:HA	2.46	0.45
1:A:1314:TYR:CD2	1:A:1320:ALA:HB2	2.52	0.45
1:A:188:ALA:O	1:A:192:GLU:HG2	2.17	0.45
1:A:256:CYS:HA	1:A:257:ARG:HA	1.63	0.45
1:A:356:ASN:OD1	1:A:374:PHE:CE1	2.70	0.45
1:A:1372:LEU:O	1:A:1381:GLU:HB2	2.17	0.45
1:A:1929:LYS:HA	1:A:1930:GLU:HA	1.55	0.45
1:A:337:LYS:C	1:A:342:ASN:CA	2.85	0.44
1:A:1635:GLU:O	1:A:1638:PRO:HD2	2.16	0.44
1:A:113:LEU:O	1:A:179:LEU:HD21	2.18	0.44
1:A:600:GLU:O	1:A:603:LYS:NZ	2.42	0.44
1:A:184:LYS:NZ	1:A:211:ARG:HH22	2.14	0.44
1:A:337:LYS:HB3	1:A:340:TRP:CE3	2.52	0.44
1:A:725:HIS:O	1:A:730:ASN:ND2	2.51	0.44
1:A:570:LEU:HA	1:A:665:TRP:HA	2.00	0.44
1:A:1695:PHE:HB2	1:A:1764:MET:SD	2.56	0.44
1:A:1889:ILE:O	1:A:1893:ASN:ND2	2.49	0.44
1:A:1386:GLN:HE22	1:A:1404:TRP:HB3	1.82	0.44
1:A:1657:THR:HA	1:A:1660:ILE:HG22	1.99	0.44
1:A:339:GLU:H	1:A:343:GLN:CA	2.30	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:391:ASP:HB3	1:A:392:PRO:HD3	1.99	0.44
1:A:782:ILE:HG13	1:A:912:ALA:HB3	1.98	0.44
1:A:915:ALA:HB1	1:A:952:PRO:HB3	2.00	0.44
1:A:1457:TRP:CZ2	1:A:1515:LYS:HD2	2.53	0.44
1:A:337:LYS:C	1:A:341:GLU:N	2.70	0.44
1:A:1375:ASP:C	1:A:1380:ILE:CA	2.87	0.43
1:A:1469:GLU:O	1:A:1473:ARG:HG2	2.18	0.43
1:A:1473:ARG:HH22	1:A:1645:GLU:H	1.64	0.43
1:A:200:LYS:HD2	1:A:205:GLN:HG2	2.00	0.43
1:A:201:TYR:N	1:A:202:PRO:HD2	2.33	0.43
1:A:385:GLU:HG2	1:A:386:ASN:H	1.84	0.43
1:A:1375:ASP:HB3	1:A:1380:ILE:HG22	1.98	0.43
1:A:1526:TYR:CZ	1:A:1538:LEU:HD22	2.53	0.43
1:A:339:GLU:CA	1:A:343:GLN:C	2.87	0.43
1:A:1515:LYS:HD3	1:A:1515:LYS:HA	1.80	0.43
1:A:499:LEU:HD23	1:A:499:LEU:HA	1.84	0.43
1:A:523:ASN:O	1:A:524:GLN:HG2	2.18	0.43
1:A:1708:VAL:HG23	1:A:1798:TRP:HH2	1.84	0.43
1:A:1933:CYS:N	1:A:1934:GLU:HB2	2.34	0.43
1:A:521:ASN:OD1	1:A:522:LYS:N	2.51	0.43
1:A:644:LEU:O	1:A:648:LEU:HD23	2.19	0.43
1:A:1026:GLY:O	1:A:1030:THR:HG23	2.19	0.43
1:A:846:ILE:HG23	1:A:890:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:923:TYR:OH	1:A:948:ASN:ND2	2.52	0.43
1:A:1836:ILE:HD12	1:A:1839:LYS:HD2	2.01	0.43
1:A:724:LYS:O	1:A:729:MET:HB3	2.17	0.43
1:A:1056:SER:OG	1:A:1201:LYS:NZ	2.31	0.43
1:A:1352:ILE:HG12	1:A:1446:ASP:HB2	2.01	0.43
1:A:1497:ILE:HD12	1:A:1498:GLN:H	1.83	0.43
1:A:54:ILE:HG13	1:A:58:HIS:NE2	2.33	0.43
1:A:285:GLU:N	1:A:285:GLU:OE1	2.52	0.43
1:A:935:LYS:HG2	1:A:936:SER:H	1.83	0.43
1:A:1118:TYR:CG	1:A:1141:LEU:HD13	2.53	0.43
1:A:1003:GLU:HB3	1:A:1113:LYS:HE2	2.00	0.42
1:A:66:PRO:HA	1:A:111:GLU:HB2	2.02	0.42
1:A:1934:GLU:HA	1:A:1935:GLU:HA	1.69	0.42
1:A:150:ASN:HB3	1:A:289:ARG:NH1	2.34	0.42
1:A:228:CYS:SG	1:A:229:GLY:N	2.93	0.42
1:A:660:LYS:HD3	1:A:712:TRP:CD1	2.54	0.42
1:A:203:LYS:HA	1:A:204:ASP:HA	1.74	0.42
1:A:846:ILE:O	1:A:850:LYS:HG3	2.20	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1519:TRP:CH2	1:A:1523:LYS:HD3	2.54	0.42
1:A:719:ILE:HD12	1:A:719:ILE:H	1.84	0.42
1:A:1741:TRP:CD1	1:A:1746:THR:HG21	2.55	0.42
1:A:652:PHE:CZ	1:A:720:TRP:HB2	2.54	0.42
1:A:683:LYS:HE3	1:A:683:LYS:HB2	1.85	0.42
1:A:691:LYS:HB3	1:A:702:SER:HA	2.02	0.42
1:A:1304:ILE:HA	1:A:1307:GLU:HG3	2.01	0.42
1:A:1377:LYS:C	1:A:1381:GLU:O	2.58	0.42
1:A:220:GLN:O	1:A:223:TRP:N	2.52	0.42
1:A:1465:ARG:HH11	1:A:1554:ILE:HD11	1.85	0.42
1:A:256:CYS:CA	1:A:257:ARG:HD2	2.49	0.42
1:A:528:GLN:O	1:A:529:LYS:HB2	2.20	0.42
1:A:701:TYR:HD2	1:A:707:LEU:HD12	1.84	0.42
1:A:1487:ILE:O	1:A:1487:ILE:HG22	2.20	0.42
1:A:1626:PRO:HA	1:A:1629:GLN:HG2	2.01	0.42
1:A:326:CYS:HB2	1:A:329:TYR:CD1	2.55	0.41
1:A:338:THR:C	1:A:345:ASN:H	2.24	0.41
1:A:339:GLU:C	1:A:343:GLN:O	2.58	0.41
1:A:1278:TRP:HZ3	1:A:1284:GLY:HA2	1.85	0.41
1:A:9:ASN:ND2	1:A:385:GLU:OE1	2.52	0.41
1:A:339:GLU:HB2	1:A:343:GLN:HG2	2.02	0.41
1:A:1174:GLU:OE2	1:A:1983:TYR:OH	2.34	0.41
1:A:1804:ASN:O	1:A:1808:GLU:HG3	2.20	0.41
1:A:121:ASN:CG	1:A:214:TRP:HE1	2.24	0.41
1:A:995:ARG:NH2	1:A:1004:LEU:HB2	2.35	0.41
1:A:235:LEU:HD13	1:A:258:LYS:HB2	2.02	0.41
1:A:842:TYR:O	1:A:846:ILE:HG12	2.20	0.41
1:A:1334:ASN:OD1	1:A:1335:ASP:N	2.54	0.41
1:A:1377:LYS:H	1:A:1381:GLU:HA	1.86	0.41
1:A:1450:SER:HB3	1:A:1525:LYS:NZ	2.36	0.41
1:A:1745:GLU:HG3	1:A:1753:ARG:HB3	2.02	0.41
1:A:655:TYR:CD2	1:A:723:MET:HE1	2.55	0.41
1:A:1056:SER:HB3	1:A:1094:LYS:HD3	2.03	0.41
1:A:1632:CYS:HB3	1:A:1665:GLU:OE1	2.21	0.41
1:A:1697:ASP:O	1:A:1701:ILE:HG13	2.21	0.41
1:A:1862:TYR:O	1:A:1865:LYS:HG2	2.19	0.41
1:A:1029:VAL:HG13	1:A:1962:THR:HG21	2.01	0.41
1:A:1056:SER:HB2	1:A:1057:CYS:HB3	2.02	0.41
1:A:1293:LYS:O	1:A:1296:LEU:HG	2.20	0.41
1:A:1339:LEU:HD23	1:A:1339:LEU:HA	1.90	0.41
1:A:337:LYS:HB2	1:A:341:GLU:H	1.82	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:685:PHE:HB3	1:A:707:LEU:HD11	2.02	0.41
1:A:897:PRO:O	1:A:901:LEU:HD23	2.21	0.41
1:A:1094:LYS:HE2	1:A:1094:LYS:HB2	1.80	0.41
1:A:1452:SER:HA	1:A:1455:LYS:HE2	2.03	0.41
1:A:1466:LEU:HD23	1:A:1466:LEU:HA	1.89	0.41
1:A:1605:TRP:CH2	1:A:1802:TRP:HB2	2.56	0.41
1:A:1606:SER:OG	1:A:1629:GLN:NE2	2.41	0.41
1:A:1710:ASP:HB2	1:A:1711:GLU:OE2	2.21	0.41
1:A:101:ARG:HD2	1:A:282:GLU:HG2	2.02	0.41
1:A:1001:ASN:HB3	1:A:1002:TYR:HB2	2.03	0.41
1:A:1294:GLU:HA	1:A:1297:LYS:HZ1	1.86	0.41
1:A:1377:LYS:C	1:A:1382:LYS:N	2.73	0.40
1:A:189:LYS:HE3	1:A:189:LYS:HB2	1.91	0.40
1:A:506:CYS:HB2	1:A:517:ASP:HB3	2.03	0.40
1:A:841:ARG:HA	1:A:841:ARG:HD2	1.93	0.40
1:A:1150:TRP:O	1:A:1154:ILE:HG12	2.21	0.40
1:A:1430:SER:HB3	1:A:1432:PHE:HE2	1.87	0.40
1:A:1585:ASN:OD1	1:A:1586:ASN:ND2	2.55	0.40
1:A:1627:ARG:NH1	1:A:1697:ASP:OD2	2.30	0.40
1:A:1810:TYR:CD2	1:A:1912:ILE:HG13	2.56	0.40
1:A:530:LYS:HD2	1:A:530:LYS:HA	1.85	0.40
1:A:1200:LYS:HD2	1:A:1200:LYS:HA	1.85	0.40
1:A:1215:SER:HB2	1:A:1216:GLU:HB3	2.04	0.40
1:A:1280:LYS:HD2	1:A:1280:LYS:HA	1.98	0.40
1:A:1431:ILE:O	1:A:1431:ILE:HG23	2.22	0.40
1:A:1749:ASN:H	1:A:1753:ARG:HH21	1.68	0.40
1:A:136:GLY:HA2	1:A:139:ILE:HG22	2.02	0.40
1:A:337:LYS:C	1:A:343:GLN:CA	2.90	0.40
1:A:1382:LYS:HG3	1:A:1382:LYS:O	2.21	0.40
1:A:1560:GLU:HB2	1:A:1564:TYR:CE2	2.57	0.40
1:A:357:LYS:HB2	1:A:374:PHE:CD2	2.56	0.40
1:A:659:ILE:HB	1:A:711:TRP:HZ3	1.87	0.40
1:A:754:ASP:OD1	1:A:755:LEU:N	2.54	0.40
1:A:1154:ILE:HG21	1:A:1164:LYS:HG2	2.04	0.40
1:A:1200:LYS:C	1:A:1203:LYS:HE2	2.41	0.40
1:A:1201:LYS:HD2	1:A:1201:LYS:HA	1.89	0.40
1:A:1473:ARG:HH12	1:A:1644:GLU:HB3	1.87	0.40
1:A:1823:PRO:HA	1:A:1824:PRO:HD3	1.90	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	1836/2040 (90%)	1628 (89%)	199 (11%)	9 (0%)	29 63

All (9) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	529	LYS
1	A	907	ASP
1	A	952	PRO
1	A	793	ASN
1	A	1366	TYR
1	A	1531	VAL
1	A	237	ILE
1	A	537	SER
1	A	1055	ILE

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	1670/1839 (91%)	1661 (100%)	9 (0%)	88 94

All (9) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	29	LYS
1	A	50	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	133	ARG
1	A	249	ARG
1	A	313	LYS
1	A	796	LYS
1	A	994	LYS
1	A	1410	ARG
1	A	1628	ARG

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (15) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	50	ASN
1	A	198	GLN
1	A	903	ASN
1	A	965	GLN
1	A	1114	GLN
1	A	1117	ASN
1	A	1134	GLN
1	A	1305	HIS
1	A	1330	GLN
1	A	1356	ASN
1	A	1427	ASN
1	A	1586	ASN
1	A	1674	ASN
1	A	1847	ASN
1	A	1972	GLN

5.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

The following chains have linkage breaks:

Mol	Chain	Number of breaks
1	A	2

All chain breaks are listed below:

Model	Chain	Residue-1	Atom-1	Residue-2	Atom-2	Distance (Å)
1	A	343:GLN	C	344:GLU	N	1.60
1	A	1381:GLU	C	1382:LYS	N	1.60

6 Map visualisation

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-14446. 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

This section was not generated.

6.2 Central slices

This section was not generated.

6.3 Largest variance slices

This section was not generated.

6.4 Orthogonal surface views

This section was not generated.

6.5 Mask visualisation

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

7 Map analysis

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

7.1 Map-value distribution

This section was not generated.

7.2 Volume estimate versus contour level

This section was not generated.

7.3 Rotationally averaged power spectrum

This section was not generated. The rotationally averaged power spectrum had issues being displayed.

8 Fourier-Shell correlation

This section was not generated. No FSC curve or half-maps provided.

9 Map-model fit

This section was not generated.